



HAL
open science

Modélisation numérique des écoulements pulmonaires

Hassan Elmi Robleh

► **To cite this version:**

Hassan Elmi Robleh. Modélisation numérique des écoulements pulmonaires. Mécanique des fluides [physics.class-ph]. Université de Strasbourg, 2012. Français. NNT : 2012STRAD025 . tel-00766647

HAL Id: tel-00766647

<https://theses.hal.science/tel-00766647>

Submitted on 18 Dec 2012

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

N° d'ordre : 1370

École Doctorale Mathématiques,
Sciences de l'Information et de l'Ingénieur

THÈSE

pour obtenir le grade de

Docteur de l'Université de Strasbourg

Discipline : Mécanique, génie mécanique, génie civil

Spécialité : Mécanique des Fluides

présentée par

Hassan ELMI ROBLEH

Modélisation numérique des écoulements pulmonaires

Soutenue publiquement le 10 Février 2012

Membres du jury

Directeur de thèse : M. J. **Dùsek**, Professeur, Université de Strasbourg

Rapporteur : Mme M. **Braza**, Directrice de Recherche, IMFT, Toulouse

Rapporteur : Mme S. **Salmon**, Professeur, Université de Reims

Examineur : M. A. **Constantinesco**, Professeur, CHU de Haute-pierre, Strasbourg

Examineur : M. D. **Favier**, Directeur de Recherche, CNRS, Université de la Méditerranée

Examineur : M. Y. **Hoarau**, HDR, Université de Strasbourg

Les travaux présentés dans ce manuscrit ont été réalisés dans le cadre d'une thèse de doctorat en Mécanique des Fluides financée par l'Université de Djibouti (UD) au travers d'une bourse doctorale en faveur des enseignants-chercheurs de l'UD. Cette thèse s'est déroulée de mars 2008 à février 2012 à l'Institut de Mécanique des Fluides et des Solides de Strasbourg (IMFS) – FRE3240 – CNRS/UdS sous la direction de Jan Dusek, Professeur à l'Université de Strasbourg et de Yannick Hoarau, HDR à l'Université de Strasbourg.

Remerciements

Je tiens tout d’abord à remercier infiniment toute l’équipe “Instabilités, turbulence, diphasique” de l’IMFS de m’avoir accueilli et de m’avoir permis de travailler pendant quatre belles années sur un sujet exceptionnellement intéressant et passionnant.

Je remercie Yves Rémond et Robert Mosé directeurs successifs de l’Institut de Mécanique des Fluides et des Solides (IMFS) de Strasbourg pour m’avoir accueilli au sein de cet Institut en tant que doctorant.

Je remercie, avant tout, Jan Dušek, mon directeur de thèse, et Yannick Hoarau, mon encadrant de thèse. J’ai eu la chance de travailler avec eux. Mes deux responsables étaient disponibles à n’importe quel moment et ils, avec une très grande patience, répondaient à mes nombreuses questions. C’est surtout grâce à leurs vastes connaissances et à leurs expériences que cette thèse aboutit en un travail aussi riche en résultats et en nouvelles découvertes. J’ai pris un énorme plaisir à être guidé, durant ma thèse, par Jan Dušek et Yannick Hoarau et, si ma carrière de chercheur est bien lancée, c’est grâce à cette thèse qu’ils ont tellement bien réussi à diriger.

J’ai été très honoré que David Favier, accepte de présider mon jury de thèse ; je souhaite le remercier et lui adresser toute ma reconnaissance pour avoir orchestré ma soutenance. Je remercie Marianna Braza et Stéphanie Salmon pour avoir évalué mes travaux de thèse en tant que rapporteurs. Je remercie également André Constantinesco d’avoir accepté de prendre part à mon jury en tant que examinateur.

Je remercie André Constantinesco du Service de Biophysique et Médecine Nucléaire au CHU de Hautepierre à Strasbourg et Andreas Fouras du département de l’Ingénierie Biomédicale de l’université de Monash en Australie pour leur précieuse collaboration.

Je remercie également Daniel Huilier, Ibrahim Souleiman Guelleh et Gilles Bouchet pour les réflexions, les questions et les conseils qu’ils m’ont prodigués dans les quelques occasions où

nous nous sommes rencontrés.

Une pensée émue pour tous les doctorants avec qui j'ai partagé une salle, un café, un repas ou une console d'ordinateur pendant ces quatre belles années : Thibaut, Cyril, Tanvir, Marcin, Emilie, Mirek, Vit, Dhiraj, Monisha, Daniel, Dhorian, Thomas, et tous les autres stagiaires... et toute la troupe du très convivial IMFS.

Thibaut et Cyril je vous suis très reconnaissant pour toute l'aide que vous m'avez apportés de près ou de loin à la réussite de ces travaux de thèse.

Mes remerciements vont également à mes étudiants, collègues, responsables pédagogiques et administratifs de l'Université de Djibouti pour leur engagement et leur collaboration de tous les instants. Que tous ceux qui ont contribué à faciliter cette étude dans ce cadre trouvent ici le témoignage de ma sincère gratitude.

Je clos enfin ces remerciements en dédiant cette thèse de doctorat à toute ma famille et aux quelques amis que j'ai eus la chance d'avoir à mes côtés, qui m'ont soutenus tout au long de ces années de travail.

Résumé

L'étude engagée dans cette thèse consiste à mettre en place une modélisation numérique fiable et complète du transport et du dépôt des particules dans un écoulement pulmonaire en se basant sur l'utilisation du code de calcul commercial *CFD-ACE*. Ce code intègre un solveur fluide qui résout les équations de Navier-Stokes incompressibles dans une formulation volumes finis. Le logiciel *CFD-GEOM* a été utilisé pour créer les surfaces en 3D de la géométrie générique du modèle de Weibel et ainsi générer le maillage non-structuré tétraédrique en volumes finis. Dans le cadre de ce travail, il est supposé que le flux d'air est laminaire, stationnaire (ou instationnaire uniquement dans les modèles bronchiques) et incompressible ; les particules de diamètre $5\mu m$ sont sphériques et sans interaction. Le pourcentage global et local du dépôt des particules dans les poumons peut s'exprimer comme une efficacité de dépôt et se définit par le rapport entre le nombre de particules déposées dans une région donnée et le nombre total de particules admises initialement à l'entrée de la conduite. L'efficacité de dépôt dépend fortement du nombre de Stokes d'entrée, des conditions d'admission en termes de profil de vitesse du fluide (nombre de Reynolds d'entrée), de la distribution et des caractéristiques des particules. Nous avons donc modélisé avec succès les écoulements ainsi que le transport et le dépôt de particules dans des configurations simples (modèles de Weibel) et des configurations réalistes (poumons de rat et du lapin) et ce que l'on en peut dire c'est que la simulation, bien que coûteuse (surtout pour le dépôt des particules), ne présente pas de difficultés insurmontables. Par contre l'obtention d'une géométrie réaliste et la génération du maillage associé reste une étape délicate.

Mots-clés : Computational fluid dynamics, modèles de poumons de Weibel, modèles de poumons réalistes, dépôt de particules.

Abstract

The study undertaken in this thesis is to develop a reliable and comprehensive numerical modeling of transport and deposition of particles in pulmonary flow based on the use of *CFD-ACE* computer code. This code includes a fluid solver that solves the Navier-Stokes in a finite volume formulation. The *CFD-GEOM* software was used to create 3D surfaces of the geometry of the generic model of Weibel and generate the unstructured tetrahedral finite volume mesh. As part of this work, it is assumed that the airflow is laminar, steady (unsteady only in bronchial models); the particles of diameter $5\mu m$ are spherical and noninteracting. The percentage of global and local particle deposition in the lungs can be expressed as a deposition efficiency and is defined as the ratio between the number of particles deposited in a given area and the total number of particles initially admitted to the entrance of lungs. The deposition efficiency depends strongly on the Stokes number of entry, the airflow fluid velocity profile (Reynolds number at the inlet), the distribution and characteristics of particles. We have successfully modeled the flow, the transport and deposition of particles in simple configurations (models of Weibel), realistic configurations (lungs of rats and rabbits) and we can conclude that the simulation, although expensive in terms of computer memory & time (especially for particle deposition), does not present insurmountable difficulties. On the other hand, obtaining a realistic geometry and mesh generation main a challenge.

Keywords : Computational fluid dynamics, Weibel's lung model, realistic lung model, deposition of particles.

Table des matières

| | |
|---|------------|
| Remerciements | i |
| Résumé | ii |
| Abstract | iii |
| Liste des tableaux | xi |
| Introduction | 1 |
| 1 Les particules inhalées dans les poumons | 7 |
| 1 Le poumon humain | 7 |
| 1.1 L'appareil respiratoire | 7 |
| 1.2 Structure et fonction de l'arbre bronchique | 8 |
| 1.3 Le mucus | 11 |
| 1.3.1 Son rôle : un filtre multifonctions | 12 |
| 1.3.2 Sa production et sa régulation | 12 |
| 1.4 Mécanique de la ventilation | 12 |
| 1.5 Conclusion | 13 |
| 2 Particules et santé humaine | 13 |
| 2.1 Particules toxiques | 14 |
| 2.2 Particules thérapeutiques | 14 |
| 3 Facteurs affectant le dépôt des particules | 15 |
| 3.1 Complexité géométrique | 15 |
| 3.2 Taille de la particule | 15 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 3.3 | Débit respiratoire | 19 |
| 3.4 | Dispositifs d'inhalation | 19 |
| 3.5 | Conclusion | 21 |
| 2 | Revue bibliographique | 23 |
| 1 | Modèles CFD de dépôt d'aérosols dans les voies aériennes | 23 |
| 2 | Caractéristiques de l'écoulement | 25 |
| 3 | Transport et dépôt des particules | 32 |
| 4 | Conclusion | 39 |
| 3 | Les processus physiques de dépôt des particules dans les voies aériennes | 41 |
| 1 | Caractéristiques des particules | 42 |
| 1.1 | Forme, diamètre et concentration des particules | 42 |
| 1.2 | Facteur de forme dynamique d'une particule | 44 |
| 1.3 | Temps de relaxation | 44 |
| 1.4 | Libre parcours moyen | 45 |
| 1.4.1 | Cas des molécules de gaz | 45 |
| 1.4.2 | Cas des particules | 46 |
| 1.5 | Domaine moléculaire | 47 |
| 2 | Mouvement des particules et forces associées | 48 |
| 2.1 | La force de traînée | 48 |
| 2.2 | La diffusion brownienne | 51 |
| 2.3 | La gravitation | 52 |
| 2.4 | L'impact inertiel | 53 |
| 2.5 | La force de portance | 54 |
| 2.6 | La turbophorèse | 57 |
| 2.7 | La thermophorèse | 57 |
| 2.8 | La diffusiophorèse | 58 |
| 2.9 | Les forces électriques | 59 |
| 2.10 | Discussion | 59 |
| 3 | Conclusion | 60 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 4 | Méthode numérique | 61 |
| 1 | Modèles géométriques | 61 |
| 2 | Équations de l'étude | 63 |
| 2.1 | Équations gouvernant l'écoulement | 63 |
| 2.2 | Équations gouvernant le transport et le dépôt des particules | 66 |
| 3 | Écoulement laminaire dans une conduite | 69 |
| 4 | Modélisation numérique utilisée | 71 |
| 5 | Conclusion du chapitre | 74 |
| 5 | Application I : Modèles bronchiques génériques | 77 |
| 1 | Simulation dans un écoulement stationnaire | 77 |
| 1.1 | Validation du code CFD-ACE | 78 |
| 1.2 | Distribution de vitesse | 79 |
| 1.3 | Distribution de la pression | 89 |
| 1.4 | Transport et dépôt des particules | 91 |
| 1.4.1 | Comportement de particules transportées | 92 |
| 1.4.2 | Efficacité de dépôt des particules | 97 |
| 1.4.3 | Effet des bifurcations en aval | 101 |
| 1.4.4 | Effet de la seconde bifurcation | 103 |
| 1.4.5 | Efficacité de dépôt des particules pour la totalité des générations | 103 |
| 1.5 | Conclusion | 104 |
| 2 | Simulation dans un écoulement instationnaire | 104 |
| 2.1 | Écoulement instationnaire | 105 |
| 2.2 | Efficacité de dépôt des particules | 106 |
| 2.3 | Conclusion | 110 |
| 3 | Conclusion du chapitre | 110 |
| 6 | Application II : Géométries réalistes | 113 |
| 1 | Poumons du rat | 114 |
| 1.1 | Vecteurs flux secondaires | 117 |
| 1.2 | Trajectoires des particules | 118 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 1.3 | Dépôt des particules | 120 |
| 2 | Poumons de lapin | 122 |
| 2.1 | Vecteurs flux secondaires | 123 |
| 2.2 | Trajectoires et dépôt des particules | 123 |
| 2.3 | Efficacité de dépôt des particules | 127 |
| 3 | Conclusion du chapitre | 128 |
| 7 | Conclusions et perspectives | 129 |
| 1 | Conclusion générale | 129 |
| 1.1 | Application I | 130 |
| 1.2 | Application II | 132 |
| 2 | Perspectives | 132 |

Liste des tableaux

| | | |
|-----|---|-----|
| 1.1 | Organisation de l'arbre bronchique et modèle de dimensions moyennes des voies aériennes (Ethier & Simmons, 2007). | 11 |
| 4.1 | Paramètres géométriques de la troisième à la neuvième génération du modèle de Weibel (1963); (Comer, Kleinstreuer & Zhang, 2001; Zhang, Kleinstreuer & Kim, 2002) (cf. Fig. 4.2) (Toutes les dimensions sont en centimètres). | 63 |
| 4.2 | Paramètres numériques de l'écoulement stationnaire (à noter que la section transversale des poumons du lapin et du rat n'est pas un cercle et D_{inlet} est un diamètre "approximatif"). | 68 |
| 4.3 | Paramètres numériques de l'écoulement instationnaire. | 68 |
| 4.4 | Résumé des données sur la grille 3D de maillages des configurations G3-G6. | 73 |
| 6.1 | Résumé des données sur la grille 3D de plusieurs maillages des poumons de rat. | 115 |
| 6.2 | Résumé des données sur la grille 3D de plusieurs maillages des poumons du lapin. | 123 |

Table des figures

| | | |
|-----|---|----|
| 1 | Schématisation d'un écoulement pulmonaire (Hoarau et al., 2007). | 1 |
| 1.1 | Schéma du système respiratoire humain (Kleinstreuer & Zhang, 2010). | 10 |
| 1.2 | Comportement du dépôt des particules inhalées dans les voies aériennes de l'homme (Taylor, 1996). | 17 |
| 1.3 | Différents types d'inhalateurs. | 20 |
| 2.1 | Modèles dans la littérature. | 24 |
| 2.2 | Résultats numériques des profils de vitesse axiale à trois sections différentes définies dans la Fig. 2.3 (Zhang & Papadakis, 2010). | 26 |
| 2.3 | Contours en 2D de vitesse axiale et vecteurs vitesses dans un modèle plan à simple bifurcation de génération (G10-G11) à $Re_{D_{inlet}} = 200$. La figure de droite montre les vecteurs vitesse dans la zone agrandie de la zone de bifurcation de débit (marqué par un rectangle dans la figure à gauche) (Zhang & Papadakis, 2010). | 27 |
| 2.4 | Contours de la vitesse axiale et de vecteurs flux secondaire (G10-G11 ; $Re_{D_{inlet}} = 200$) (Zhang & Papadakis, 2010). | 27 |
| 2.5 | Vecteurs flux secondaires dans deux modèles à double bifurcation de génération G5-G7 (Liu et al., 2002) | 28 |
| 2.6 | Profils de vitesse axiale à différentes sections de G5-G7 (Liu et al., 2002). | 29 |
| 2.7 | Variations du coefficient de chute de pression en fonction du nombre de Reynolds : (a) comparaison de deux modèles (Liu et al., 2002) et (b) comparaison de deux types de profils de vitesses d'admission (Zhang, Liu, So & Phan-Thien, 2002). | 30 |

| | | |
|------|---|----|
| 2.8 | Flux de vecteurs vitesse dans un modèle plan à triple génération (<i>G5-G7</i>) à $Re_{D_{inlet}} = 900$: (a) profil de vitesse d'entrée uniforme, (b) profil de vitesse d'entrée parabolique (Yang, Liu, So & Yang, 2006). | 30 |
| 2.9 | Structures de l'écoulement et mouvement des particules en condition d'exercice modéré : (a) vecteurs de vitesse axiale dans le plan moyen, et (b) vues en coupe des contours vitesse axiale, vecteurs de l'écoulement secondaire ainsi que distributions des particules et directions d'écoulement (en bas). La moitié inférieure représente les vecteurs unitaires instantanées du mouvement des particules (Comer, Kleinstreuer & Zhang, 2001). | 33 |
| 2.10 | Dépôt des particules dans un modèle bouche-gorge (Longest & Holbrook, 2011). | 34 |
| 2.11 | Transport et dépôt des particules inhalées dans un modèle composé de bouche-gorge (<i>MT</i>) - trachéobronchéal (<i>TB</i>) : (a) les trajectoires et (b) de dépôt en fonction de la taille des particules (Tian et al., 2011). | 35 |
| 2.12 | Positions de quelques particules à l'entrée de la conduite d'admission et leurs trajectoires après libération (Comer, Kleinstreuer & Kim, 2001). | 36 |
| 2.13 | Comparaison des efficacités de dépôt pour un modèle à double bifurcation : (a) première bifurcation et (b) seconde bifurcation (Comer, Kleinstreuer & Kim, 2001). | 37 |
| 2.14 | Efficacités de dépôt des particules mesurées expérimentalement en fonction du paramètre d'impact (Cheng et al., 1999). | 38 |
| 2.15 | Efficacités de dépôt des particules mesurées expérimentalement en fonction du nombre de Stokes (Cheng et al., 1999). | 38 |
| 3.1 | Forme naturelle des aérosols : (a) pollens, la forme sphérique <i>parfaite</i> (taille de dizaines de μm) et (b) amiante, en forme de bâtonnets (échelle 10 μm) (Dénes Bejat, 2007). | 42 |
| 3.2 | Les différents diamètres caractéristiques couramment utilisés (Dénes Bejat, 2007). | 43 |
| 3.3 | Libre parcours moyen (a) d'une molécule de gaz et (b) du centre d'une particule (Dénes Bejat, 2007). | 46 |
| 3.4 | Définition géométrique du libre parcours moyen d'une particule (Dénes Bejat, 2007). | 47 |
| 3.5 | Coefficient de traînée en fonction du nombre de Reynolds de la particule (Dénes Bejat, 2007). | 50 |

| | | |
|------|--|----|
| 3.6 | Coefficient de Cunningham à $293K$ et à la pression atmosphérique (Dénes Bejat, 2007). | 51 |
| 3.7 | Schéma descriptif de différents diamètres équivalents (Hinds, 1999). | 53 |
| 3.8 | Collection des particules par impact inertiel | 54 |
| 3.9 | Effet Magnus autour d'une particule en rotation (El Akoury, 2007) | 55 |
| 3.10 | Force de thermophorèse ($d_p < \lambda_f$) (Abadie, 2000). | 58 |
| 4.1 | Schématisation symétrique de la géométrie à triple bifurcation. | 62 |
| 4.2 | Modèles de l'arbre bronchique : (a) modèle plan sans anneaux trachéaux, (b) modèle plan avec anneaux trachéaux, (c) modèle hors-plan 1, (d) modèle hors-plan 2, (e) modèle hors-plan 2 à cinq générations, (f) modèle hors-plan 2 à six générations et (g) modèle hors-plan 2 à sept générations. | 64 |
| 4.3 | Écoulement de Poiseuille dans une conduite cylindrique (Dennis, 2003). | 70 |
| 4.4 | Comparaison des différents maillages non-structuré à cellules tétraédrique pour $Re_{D_{inlet}}=1\,000$. | 72 |
| 4.5 | Maillage non-structuré à 393 660 cellules tétraédriques. | 72 |
| 4.6 | Gros plan sur le maillage au niveau de la seconde bifurcation interne de la géométrie de la Fig. 4.5. | 73 |
| 5.1 | Écoulement laminaire et stationnaire, $Re_{D_{inlet}} = 500$: (a) convergence de la solution initiale, (b) vue en 2- D de l'écoulement et (c), (d), (e) vitesse axiale. | 78 |
| 5.2 | Comparaison entre les résultats numériques et les mesures expérimentales de Zhao & Lieber (1994) des profils de vitesse axiale d'un modèle plan à une seule bifurcation dans une voie aérienne à triple bifurcation avec $Re_{D_{inlet}} = 500$, aux emplacements 2, 10 et 14 de la Fig. 5.1(b). | 80 |
| 5.3 | Comparaison des efficacités de dépôt des particules (DE) numériques et expérimentales dans le modèle plan à double bifurcation sous flux constant (données expérimentales obtenues à partir de Kim & Fisher (1999)) : (a) DE à la première bifurcation et (b) DE à la seconde bifurcation. | 81 |
| 5.4 | Profils de vitesse axiale. | 82 |

| | | |
|------|--|----|
| 5.5 | Vecteurs vitesse axiale à $Re_{D_{inlet}}=1000$: (a) sur une configuration plane, au niveau des bifurcations (b), (c), (e) et (f); (d) sur un modèle hors-plan 1 au niveau de la seconde bifurcation. | 84 |
| 5.6 | Représentation graphique des types d'écoulement d'air axial et secondaire dans le poumon (Wolfgang & Rabczuk, 2008). | 85 |
| 5.7 | Vecteurs flux secondaires : (a) au milieu de $G4$, (b) au milieu de $G5$ externe et (c) au milieu de $G5$ interne (voir (a), (b) et (c) dans le modèle plan en bas à gauche); (d) au milieu de $G4$, (e) au milieu de $G5$ supérieure et (f) au milieu de $G5$ inférieure (voir (d), (e) et (f) dans le modèle hors-plan 1 en bas à droite). . . | 86 |
| 5.8 | Vue tridimensionnelle de zone de recirculation des flux secondaires pour $Re_{D_{inlet}}=1000$ dans une configuration plane. | 87 |
| 5.9 | Vue tridimensionnelle de zone de recirculation des flux secondaires pour $Re_{D_{inlet}}=1000$ dans une configuration hors-plane 2. | 88 |
| 5.10 | Variation du coefficient de chute de pression C_p avec $Re_{D_{inlet}}$ | 90 |
| 5.11 | Contours de la pression statique sur la paroi des voies aériennes de l'arbre bronchique : (a) modèle plan de $G3 - G6$, (b) modèle hors-plan 1 de $G3 - G6$, (c) modèle hors-plan 1 de $G3 - G7$, (d) modèle hors-plan 1 de $G3 - G8$ et (e) modèle hors-plan 1 de $G3 - G9$ | 91 |
| 5.12 | Positions des particules à différents instants de temps au cours du débit inspiratoire ($Re_{D_{inlet}} = 500$ & $St = 0.02$) : (a) $t = 0.005s$, (b) $t = 0.06s$, (c) $t = 0.08s$, (d) $t = 0.1s$, (e) $t = 0.12s$ et (f) $t = 0.15s$ | 92 |
| 5.13 | Zoom sur les particules observées près de la paroi du cylindre-parent (voir Fig. 5.12(d)). | 93 |
| 5.14 | Comportement des particules libérées proche paroi à maillage tétraédrique non-structuré (voir Figs. 5.12(a) et (d)). | 94 |
| 5.15 | Vues en trois dimensions des modes de dépôt local des particules sous inhalation régulière pour $Re_{D_{inlet}}=1000$ | 95 |
| 5.16 | Modes de dépôt des particules dans les différentes bifurcations de trois types de configurations de génération $G3-G6$ | 96 |

| | | |
|------|--|-----|
| 5.17 | Efficacités de dépôt des particules à l'ensemble des bifurcations : (a) $Re_{D_{inlet}} = 500$, (b) $Re_{D_{inlet}} = 1\ 000$ et (c) $Re_{D_{inlet}} = 1\ 500$ | 98 |
| 5.18 | Comparaisons des efficacités de dépôt ($DE\%$) des particules en fonction de la bifurcation (en ligne) et du nombre de Reynolds (en colonne) $500 \leq Re_{D_{inlet}} \leq 1\ 500$ pour les quatre modèles bronchiques à triple bifurcation : pour $Re_{D_{inlet}} = 500$ (première ligne), (a) à la première bifurcation, (b) à la seconde bifurcation et (c) à la troisième bifurcation ; pour $Re_{D_{inlet}} = 1\ 000$ (seconde ligne), (d) à la première bifurcation, (e) à la seconde bifurcation et (f) à la troisième bifurcation ; pour $Re_{D_{inlet}} = 1\ 500$ (troisième ligne), (g) à la première bifurcation, (h) à la seconde bifurcation et (i) à la troisième bifurcation. | 100 |
| 5.19 | Dépôt des particules inhalées dans des modèles hors-plan multigénérationnels : (a) efficacité de dépôt des particules ; sous flux d'inhalation ($Re_{D_{inlet}} = 1\ 000$) ; (b) modèle à 4 générations ; (c) modèle à 5 générations ; (d) modèle à 6 générations ; et (e) modèle à 7 générations. | 102 |
| 5.20 | Efficacité de dépôt des particules pour différentes configurations. | 103 |
| 5.21 | Efficacité de dépôt des particules à l'ensemble des bifurcations. | 104 |
| 5.22 | Forme d'onde d'entrée du flux. | 105 |
| 5.23 | Vecteurs flux secondaires : (a) au milieu de $G4$, (b) au milieu de $G5$ externe et (c) au milieu de $G5$ interne (voir (a), (b) et (c) dans le modèle plan en bas). | 107 |
| 5.24 | Efficacité de dépôt des particules des modèles à triple bifurcation ; sous flux d'inhalation ($Re_{D_{inlet}} = 433$) pour l'ensemble des bifurcations. | 108 |
| 5.25 | Efficacité de dépôt des particules des modèles à triple bifurcation ; sous flux d'inhalation ($Re_{D_{inlet}} = 433$) ; (a) à la première bifurcation, (b) à la seconde bifurcation et (c) à la troisième bifurcation. | 109 |
| 6.1 | (a) Scanner à rayon- X $\mu - CT$ (eXplore Vision 120, GE Healthcare, Waukesha, USA), (b) images issues du scanner et (c) reconstruction $3D$ des poumons de rat. | 114 |
| 6.2 | (a) Suppression des artéfacts de la segmentation sous $gmsb$ pour obtenir la configuration finale (b). | 115 |
| 6.3 | Reconstruction poumons de rat - Image CHU Hautepierre - Pr. Constantinesco par Y. Hoarau (IMFS) - Maillage par S. Salmon. | 116 |

| | | |
|------|--|-----|
| 6.4 | Visualisation de la perte de charge et des lignes de courant dans le poumon du rat. | 117 |
| 6.5 | Vecteurs flux secondaires. | 118 |
| 6.6 | Trajectoires des particules transportées. | 119 |
| 6.7 | Trajectoires des particules dans les parties agrandies. | 119 |
| 6.8 | Modes de dépôt des particules dans les poumons du rat. | 120 |
| 6.9 | Efficacité de dépôt des particules pour $Re_{D_{inlet}} = 152$ | 121 |
| 6.10 | (a) Géométrie des poumons de lapin issue de la segmentation, (b) lignes de courant et pertes de charge issues de la simulation sur un maillage à 4.4 millions de cellules. | 122 |
| 6.11 | Vecteurs flux secondaires (voir les positions (a) et (b) des coupes de sections dans la configuration du poumon du lapin). | 124 |
| 6.12 | Trajectoires de quelques particules pour $Re_{D_{inlet}} = 176$ | 125 |
| 6.13 | Zoom sur les comportements des trajectoires des particules dans la zone proche d'intubation : (a) en présence de la paroi et (b) sans la paroi. | 126 |
| 6.14 | Modes de dépôt des particules dans les poumons du lapin pour $Re_{D_{inlet}} = 176$. . | 127 |
| 6.15 | Efficacité de dépôt des particules dans les poumons du lapin pour $Re_{D_{inlet}} = 176$. | 128 |
| 7.1 | Principe de la méthode IBM : maillage numérique raffiné $\Omega = \Omega_b + \Omega_f$; maillage de surface immergé Γ_b ; région non-fluide Ω_b et région fluide Ω_f (Hylla et al., 2011). | 134 |

Introduction

Les techniques de simulations numériques d'écoulements complexes et d'interaction fluide-structure ont atteint un niveau de maturité et de performance tel que l'on peut maintenant s'intéresser à des problèmes multi-physiques complexes. Les simulations donnent accès à un niveau de détail et de phénomènes qu'il est impossible de reproduire à l'heure actuelle par des méthodes in vivo ou in vitro.

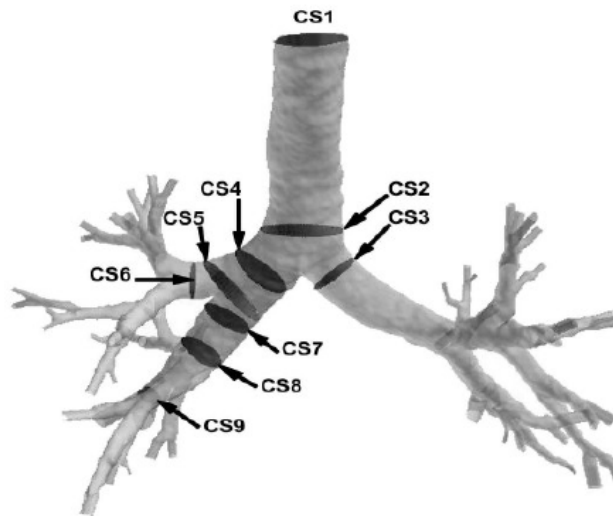


FIGURE 1 – Schématisation d'un écoulement pulmonaire ([Hoarau et al., 2007](#)).

Un écoulement pulmonaire est caractérisé par une suite de bifurcations (Fig. 1). Les écoulements laminaires dans ce type de bifurcations ont déjà été étudiés par de nombreux auteurs, mais peu de chercheurs se sont intéressés aux effets de la turbulence amont. En effet, bien que l'écoulement soit laminaire dans les bronches (du moins pour une respiration normale), il est turbulent dans les voies aériennes supérieures. Cet aspect turbulent est primordial, car cela

modifie notablement le transport et le dépôt des particules. De plus, beaucoup de recherches actuelles considèrent un écoulement stationnaire à l'entrée et ne reproduisent donc pas le cycle de la respiration. Ces écoulements aériens pulmonaires modélisés par un système anatomiquement réaliste de conduits et d'embranchements, sont gouvernés par des contractions et des mouvements d'expansion du système aérien et des sacs alvéolaires.

Les accidents respiratoires ont une grande importance dans notre société. On estime à plus de 100 milliards d'euros les conséquences économiques de ces accidents, le cancer des poumons étant le plus mortel. L'asthme chez les enfants a quadruplé ces trente dernières années en Europe. Il en résulte que l'amélioration des techniques de diagnostic et de thérapie ainsi que l'amélioration de la pertinence des contrôles pré-opératoires jouent un rôle capital dans le monde médical européen ainsi que chez les biomécaniciens et l'impact de tout progrès en ce sens serait très important : la prévention et les dépistages précoces de ces pathologies sont en général bien moins onéreux pour la société que des soins à long terme.

Parmi les domaines de la physiopathologie humaine et des technologies de la santé qui ont retenu les attentions des scientifiques, le système respiratoire, les voies aériennes et les poumons sont des domaines qui ont accumulé beaucoup de retard. Cela est dû en partie à la complexité anatomique et physiologique de l'arbre bronchique. Le système respiratoire est aussi source de nombreuses pathologies : l'asthme, le cancer du poumon, la fibrose cystique, les emphysèmes pulmonaires, la génération de murmure par des constrictions géométriques, ... Les connaissances des mécanismes en jeu dans la respiration sont très diffuses et incomplètes à l'heure actuelle et cela gêne considérablement les efforts dans le développement de meilleures approches de prévention et de soins.

Aujourd'hui, la dynamique des fluides (une science de tous les jours, mais qui paraît très inconnue) est un domaine très actif de la recherche avec de nombreux problèmes non résolus encore ou partiellement résolus. Elle utilise systématiquement des méthodes numériques plus connus sous le nom de Computational Fluid Dynamics (*CFD*).

Cette présente étude s'intéresse à la modélisation numérique des écoulements pulmonaires en se basant sur l'utilisation du code de calcul commercial *CFD-ACE*. Ce code intègre un

solveur fluide qui résout les équations de Navier-Stokes incompressibles dans une formulation volume fini et un solveur solide basé sur une discrétisation par éléments finis. Le solveur fluide incompressible comporte une formulation prédicteur-correcteur SIMPLEC et associe plusieurs schémas spatiaux (centré et décentré) à deux schémas temporels (backward Euler et Crank-Nicolson). Les maillages peuvent être structurés ou non-structurés. Pour permettre l'étude de différents fluides, plusieurs modèles de densité et de viscosité (constante, polynomiale, loi de puissance, loi de Sutherland...) et une interface avec des routines fortran sont disponibles. Les dernières nous permettent notamment d'implémenter des modèles de fluides non-newtoniens. De nombreux modèles de turbulence sont aussi déjà implémentés (Spalart-Allamaras, différentes variantes des modèles $k - \varepsilon$ et $k - \omega$, LES) et d'autres modèles peuvent y être ajoutés via une routine fortran. L'objectif de cette étude consiste donc à proposer une modélisation numérique fiable et complète du transport et de dépôt des particules dans un écoulement pulmonaire.

Afin de comprendre et de caractériser le transport et le dépôt des particules inhalées dans les voies aériennes humaines, de nombreux auteurs ont mené différentes études expérimentales et numériques qui ont abouti à des résultats pertinents. **Le chapitre 1** donne une brève introduction au système respiratoire humain. Les caractéristiques physiques de chaque partie composant la voie aérienne y sont évoquées. Une attention particulière est accordée à la région des voies aériennes supérieures en raison de sa pertinence dans la présente étude. Une brève introduction est donnée quant à la manière dont les aérosols et les voies respiratoires humaines sont liées, suivie par quelques détails des facteurs et des mécanismes affectant le transport et le dépôt d'aérosols dans les voies aériennes supérieures.

La revue bibliographique sur les études existantes de modèles d'une liste de flux et de transport de particules dans les voies aériennes supérieures constitue **le chapitre 2**. La géométrie des voies aériennes supérieures avec une multitude de degrés de complexités géométriques utilisées dans la littérature est dressée. Les géométries des voies respiratoires sont présentées dans l'ordre de leur complexité, c'est à dire, du plus simple au plus complexe. Les méthodes de modélisation utilisées pour l'étude CFD du fluide ainsi que le transport des particules sont signalées. Les modes de l'écoulement du fluide ainsi que les caractéristiques du dépôt d'aérosols observées par divers chercheurs dans les différentes géométries des voies aériennes supérieures sont discutés.

En combinant différentes données de dépôt dans les voies respiratoires supérieures humaines, plusieurs auteurs ont imaginé des modèles mathématiques relativement simples pour prédire la quantité d'aérosols inhalés qui peut se déposer dans les voies aériennes supérieures. Toutes ces corrélations se rapportant aux voies aériennes supérieures et leurs limites particulières sont discutées. En outre à ce chapitre d'étude de la littérature qui fournit un bref résumé des observations les plus importantes, s'associe une section d'introduction de chaque chapitre dans cette thèse qui aborde également la documentation pertinente relative au chapitre concerné.

Le chapitre 3 décrit les différents processus physiques responsable du mouvement de particules dans un écoulement donné. Un rappel des principaux aspects de mouvement de particules et forces associées intervenant dans le cadre de cette étude est présenté en détail.

Le chapitre 4 évoque les différents types de configurations symétriques des voies aériennes supérieures humaines à multiple bifurcation et à paroi rigide. De nombreux modèles sont considérés. La géométrie correspond au modèle de [Weibel \(1963\)](#), de la troisième à la sixième génération de bifurcations. Les données du modèle de base sont données par [Horsfield et al. \(1971\)](#); [Comer, Kleinstreuer & Zhang \(2001\)](#); [Li et al. \(2007c\)](#) dans leurs diverses publications. Ensuite, les équations gouvernant l'écoulement du fluide et le transport des particules, appartenant à la méthode de modélisation employée dans la présente thèse, sont discutées. Et enfin, dans cette étude, les équations sont résolues par le package commercial *CFD* du logiciel *ACE* sur un maillage tétraédrique non-structuré avec une discrétisation centrée.

Même si le concept de maillage non-structuré tétraédrique existe depuis longtemps, l'applicabilité pratique est encore dans un stade de bourgeonnement. Dans cette optique, les méthodes de modélisation décrites dans ce chapitre peuvent être considérées comme la première étape d'application des maillages non-structurés pour des applications biomédicales, qui sont de loin les seules options pour éviter des expériences coûteuses pour la configuration de la géométrie réaliste. Les deux chapitres suivant, à savoir *les chapitres 5 et 6* sont des applications directes étudiant l'écoulement du flux d'air et les caractéristiques de dépôt des particules. L'étude numérique de la thèse se concentre sur la simulation du transport et du dépôt des particules sur des modèles pour des écoulements stationnaires et instationnaires sans mouvements de paroi (première application). Le modèle ainsi obtenu est appliqué à la simulation de l'écoulement et

le dépôt des particules dans deux géométries réalistes de poumons de rat et de lapin (seconde application) qui sont générées par un μ -CT de reconstruction d'un animal réel et fournies par les biophysiciens de la médecine nucléaire, CHU Hautepierre, Strasbourg et de l'université de Monash en Australie.

Chapitre 1

Les particules inhalées dans les poumons

1 Le poumon humain

Le poumon humain est une succession de bifurcations à deux branches. Il est composé en moyenne de 23 générations de bifurcations soit environ 17 millions de bifurcations. Les cinq dernières générations sont recouvertes de structures cellulaires à travers lesquelles l'échange a lieu entre l'air et le sang (Weibel, 1984). Dans la littérature, de nombreux modèles sont rencontrés et ont déjà été l'objet d'études numériques et expérimentales. Dans cette partie, afin de comprendre ce vaste réseau primordial pour la vie, nous présentons le fonctionnement et la structure du système respiratoire de l'homme.

1.1 L'appareil respiratoire

Le poumon est une vaste surface d'échange de $75m^2$. L'appareil respiratoire a une fonction essentielle : les échanges gazeux (apport d'oxygène et élimination de gaz carbonique). À cette fonction est associée la fonction d'épuration qui assure la bonne qualité de l'air qui arrive dans les alvéoles pulmonaires en éliminant les aérocontaminants. L'appareil respiratoire peut-être divisé en deux grandes parties (Fig. 1.1) :

- les voies aériennes supérieures : nez (poils, cornets), bouche, pharynx, larynx.

- les voies aériennes inférieures : trachée-artère, arbre bronchique ramifié (bronches souches, bronches lobaires, bronches segmentaires, ..., bronchioles), alvéoles.

La modélisation mathématique du transport dans l'arbre trachéobronchique a déjà fait l'objet de plusieurs travaux, parmi lesquels les thèses de [Maury \(2004\)](#), [Soualah-Alila \(2008\)](#) et très récemment [Moussa \(2009\)](#). On trouve dans leurs ouvrages une description détaillée de la modélisation de l'arbre pulmonaire, de sa géométrie et sa physiologie ainsi que de la mécanique ventilatoire. Citons également l'ouvrage de référence de [Weibel \(1984\)](#) qui est une véritable mine d'informations en physiologie pulmonaire. Dans cette partie, nous allons présenter quelques propriétés classiques des voies respiratoires.

1.2 Structure et fonction de l'arbre bronchique

Le rôle de l'arbre bronchique est de conduire l'air ambiant, riche en oxygène et pauvre en dioxyde de carbone, vers la surface d'échange avec le sang à l'intérieur des acinus. La figure [1.1](#) montre le schéma général du système respiratoire humain. La complexité de la structure est frappante. On peut observer que la géométrie est arborescente et plus précisément, que cet arbre est quasiment dichotomique. Cette remarque permet de le considérer comme une succession de générations (Fig. [1.1](#)). Cette terminologie, très pratique, est utilisée tout au long des études qui vont suivre. La première génération correspond à la plus grosse branche, la trachée. Elle a un diamètre de l'ordre de deux centimètres. La dernière, la vingt-troisième génération, est située au fond de l'acinus et a un diamètre de l'ordre du demi-millimètre. Le nombre de branches de cet arbre est donc à peu près de 2^{24} soit plus de seize millions, mais la surface d'échange ne se situe qu'au niveau des dernières générations (pour les dimensions moyennes usuelles des modèles des voies aériennes d'après [Weibel \(1963\)](#), voir table [1.1](#)). Le poumon peut être divisé en deux régions de fonctionnement distinctes :

- **La région proximale** (l'arbre bronchique) est constituée des dix-sept premières générations de bifurcations et a pour seul rôle l'acheminement de l'air vers les dernières générations que constituent les acinus (on parle d'espace mort).
- Un acinus est un sous-arbre du poumon d'à peu près six générations (depuis la dix-huitième jusqu'à la vingt-troisième), leur nombre est de l'ordre de 30 000 et l'ensemble des acinus

constitue **la zone distale**. A ces profondeurs, les branches sont recouvertes d'alvéoles et deux phénomènes y sont a priori couplés : la convection de l'air et les échanges gazeux entre l'air et le sang.

Outre la présence des alvéoles, il existe une rupture dans les propriétés géométriques du poumon quand on passe de l'arbre bronchique aux acinus, par exemple les diamètres des bronches, qui diminuent tout au long des dix-sept premières générations, se stabilisent dans les générations acinaires ([Weibel, 1984](#)) (Fig. 1.1).

Considérons d'abord les propriétés géométriques de l'arbre bronchique. Les bronches ont une forme cylindrique, légèrement conique vers le bas de l'arbre. Leur surface est annelée par la structure cartilagineuse recouvrant les premières générations de bronches. Ce cartilage disparaît petit à petit quand la génération augmente, laissant place à un muscle lisse le long de la paroi. Il est capable de modifier le diamètre de petites bronches, mais sa véritable fonction reste encore inconnue. Il pourrait, par exemple, aider à réguler les écoulements d'air dans les voies aériennes ou bien protéger les bronchioles de l'obstruction. Une muqueuse protège la surface de toutes les bronches. Celles qui sont recouvertes de cartilages sont plutôt rigides (trachée, grosses bronches) tandis que les bronchioles ont une géométrie beaucoup plus souple et leur taille peut varier, par exemple au cours de la respiration. Les branchements, dichotomiques, sont sujets à une certaine dissymétrie, très amplifiée dans les premières générations qui s'adaptent à l'anatomie globale. Par exemple, les premières branches doivent contourner le cœur et divisent le poumon de façon asymétrique, en trois lobes droits et deux lobes gauches. Elles deviennent moins irrégulières et même quasiment homothétiques d'une génération à l'autre à mesure que l'on s'enfonce dans l'arbre. Le facteur d'homothétie varie en fait assez peu entre les générations. Enfin, citons quelques propriétés qui nous intéresseront particulièrement par la suite : les angles entre deux plans de branchements successifs sont proches de quatre-vingt-dix degrés et le rapport longueur sur diamètre des branches est de l'ordre de trois dans tout l'arbre. Toutes ces propriétés sont des observations moyennes. En effet en tant que matière vivante, le poumon est soumis à l'inévitable variabilité physiologique qui existe entre les individus (due aux contraintes géométriques, à l'environnement, etc.).

Les alvéoles sont de petits sacs qui sont perfusés par des capillaires contenant le sang artériel pulmonaire et dans lesquels l'oxygène de l'air est échangé avec le dioxyde de carbone du sang. On assimile les alvéoles à des sphères dont le rayon peut varier de $r_e = 0.06mm$ à la fin de l'expiration à $r_i = 0.1mm$ à la fin de l'inspiration.

Les acinus sont des arbres dichotomiques constitués de branches de diamètres quasiment identiques (environ $0.5mm$). Les alvéoles recouvrent de plus en plus les branches à mesure que l'on s'enfonce dans la structure. Les acinus remplissent la majeure partie du volume disponible (90% du volume total du poumon). Dans ces générations, l'air se déplace très lentement et la diffusion a un rôle important dans le transport de l'oxygène et du dioxyde de carbone dans les bronches. C'est encore la diffusion, à travers une membrane, qui gère les transferts des molécules entre le gaz alvéolaire et le sang.

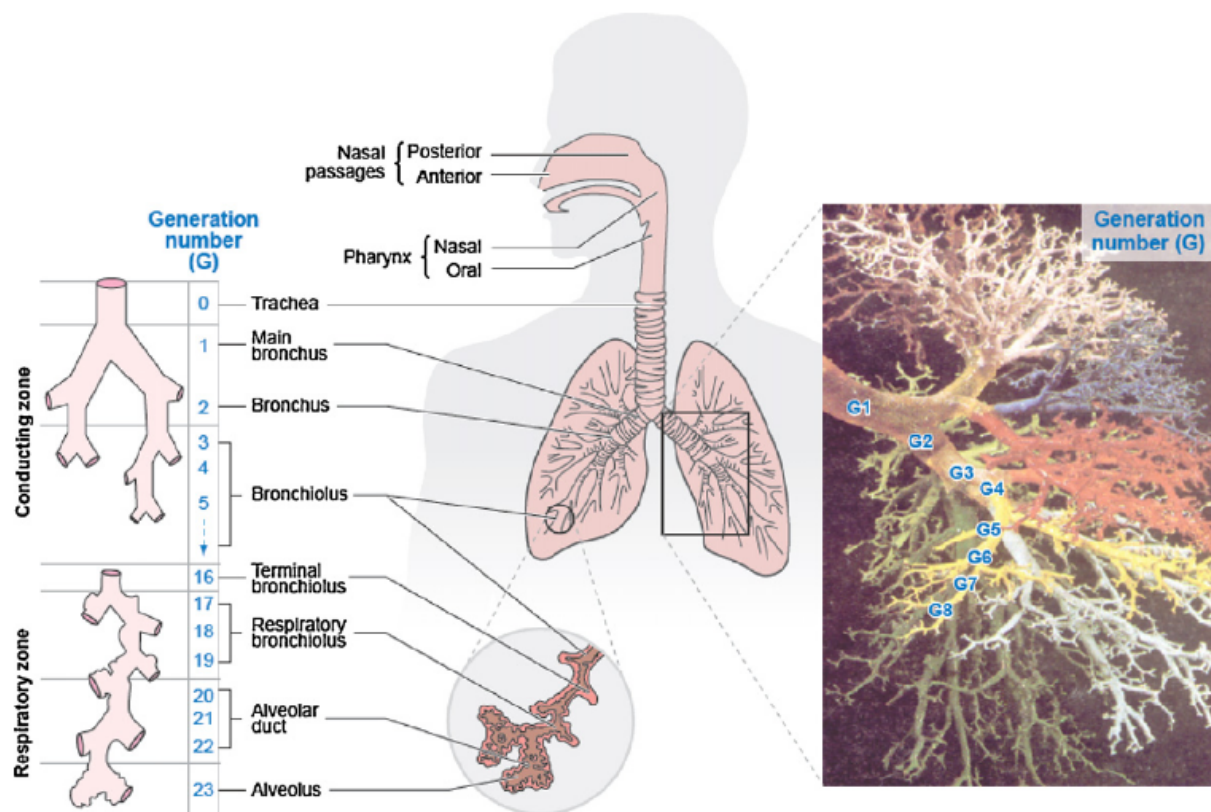


FIGURE 1.1 – Schéma du système respiratoire humain (Kleinstreuer & Zhang, 2010).

| Génération | Nom | Diamètre (<i>mm</i>) | Surface (<i>cm</i> ²) | Nombre |
|------------|-----------------------------|---------------------------|---------------------------------------|------------|
| 0 | Trachée | 18 | 2.54 | 1 |
| 1 | Bronches principales | 12.2 | 2.33 | 2 |
| 2 | Bronches lobaires | 8.3 | 2.13 | 4 |
| 3 | Bronches segmentaires | 5.6 | 2 | 8 |
| 4 | Bronches sub-segmentaires | 4.5 | 2.48 | 16 |
| ... | | | | |
| 12 | Bronchioles | 0.95 | 28.8 | 4 096 |
| 13... | Bronchioles | 0.82 | 44.5 | 8 192 |
| 16 | Bronchioles terminales | 0.49 | 225 | 65 536 |
| 17 | Bronchioles respiratoires 1 | 0.40 | 300 | 131 072 |
| 18 | Bronchioles respiratoires 2 | 0.38 | 543 | 262 144 |
| 19 | Bronchioles respiratoires 3 | 0.36 | 978 | 524 288 |
| 20 | Conduit alvéolaire 1 | 0.34 | 1 743 | 1 048 576 |
| 21 | Conduit alvéolaire 2 | 0.31 | 2 733 | 2 097 152 |
| 22 | Conduit alvéolaire 3 | 0.29 | 5 070 | 4 194 304 |
| 23 | Alvéoles | 0.25 | 7 530 | 81 388 608 |

TABLE 1.1 – Organisation de l’arbre bronchique et modèle de dimensions moyennes des voies aériennes (Ethier & Simmons, 2007).

1.3 Le mucus

Les parois des conduits pulmonaires ne se trouvent pas directement en contact avec l’air. Elles sont recouvertes d’un mucus aux fonctions multiples (Widdicombe, 2002).

1.3.1 Son rôle : un filtre multifonctions

Le mucus a pour vocation de piéger les particules inhalées afin qu'elles ne rentrent pas en contact avec le milieu intérieur. Cette fonction est en particulier assurée dans la trachée et les premières générations de bronches. Le deuxième attribut de ce mucus est encore un rôle de protection grâce à ses propriétés antibactériennes. De plus, il hydrate les cellules de la paroi (épithéliales) qui, sans cela, se dessècheraient (Grotberg, 1994). Il facilite enfin les échanges gazeux grâce à des surfactants et des protéines.

1.3.2 Sa production et sa régulation

Le mucus est produit dans les grosses bronches par des glandes, appelées submucosales et des cellules sécrétrices, les cellules caliciformes (Widdicombe, 2002). Dans la trachée, on trouve environ une glande par millimètre carrée de surface épithéliale. Le nombre des glandes diminue au fur et à mesure que l'on parcourt les embranchements. Dans les petites bronchioles, leurs fonctions sont assurées par les cellules sécrétrices moins matures (Duclaux, 2006).

1.4 Mécanique de la ventilation

La respiration est basée sur le mouvement d'une nappe musculaire située entre le haut de l'abdomen et le bas du thorax : **le diaphragme**. La contraction de ce muscle induit une expansion de la cage thoracique de laquelle résulte une dépression dans les poumons, provoquant une entrée d'air. D'autres muscles participent plus modérément à cette augmentation du volume inspiratoire : les muscles intercostaux écartent les côtes et les muscles scalènes, tendus entre les vertèbres et le haut de la cage thoracique, élèvent les premières côtes. Selon que l'on considère une ventilation au repos ou un régime d'exercice, le comportement du système pulmonaire varie de manière conséquente. Par exemple, la zone de transport introduite dans la sous-section précédente s'étend de quelques générations en régime d'exercice. De même, alors que l'inspiration au repos est active (contraction des muscles), l'expiration est passive puisqu'elle consiste uniquement en la relâche des muscles précédemment sollicités. L'expiration forcée est, elle, un

processus musculaire actif qui fait appel aux muscles intercostaux et abdominaux. Le découpage physiologique (zone proximale)/(zone distale) se traduit également en physique. En effet, l'évolution de la vitesse de l'air dans l'arbre permet de diviser celui-ci en trois régions distinctes. Le déplacement de l'air dans la zone proximale est réalisé par convection, à l'instar d'un liquide qui s'écoule dans un tuyau. La région proximale est divisée en deux. Sur les cinq premières générations la vitesse de l'air varie entre 1m/s (dans la trachée) et environ 10cm/s (à la cinquième génération). Ensuite, dans la région s'étendant de la sixième à la dixième génération, la vitesse de l'air diminue (une fraction de centimètre par seconde à l'entrée de l'acinus) et les phénomènes de viscosité prennent de plus en plus d'importance dans l'écoulement. À partir de la dix-huitième génération (début des acini) et jusqu'au bout de l'arbre, la convection cesse d'être le phénomène prédominant de transport et elle est remplacée par la diffusion. Au début de la zone distale, le modèle associé est celui de la convection-diffusion. Un travail préliminaire dans lequel on suppose que la diffusion n'influence pas la convection de l'air a été effectué par Felici et al. (2005).

1.5 Conclusion

Le poumon est globalement composé d'un arbre bronchique ayant la structure d'une arborescence dichotomique. Afin d'assurer son rôle d'apport d'oxygène et d'élimination du dioxyde de carbone, le poumon jouit d'un mouvement rythmé par une phase d'inspiration et une autre d'expiration dont la fréquence est réglée en fonction de la saturation d'oxygène dans le sang par le système nerveux central. Le diaphragme reste l'acteur principal puisque l'inspiration est active alors que l'expiration est passive.

2 Particules et santé humaine

Les particules inhalées nocives d'origine industrielle peuvent avoir des répercussions sur notre santé et causer des risques sanitaires alors que d'autres particules sont utilisées pour administrer des médicaments et soigner les affections pulmonaires.

2.1 Particules toxiques

On sait depuis longtemps que l'inhalation des polluants dispersés dans l'air sous forme de gaz ou de particules (aérosols) et contenant des substances nocives ou toxiques est à l'origine de diverses pathologies chez l'homme ayant des conséquences plus ou moins graves. Jusqu'alors, la gamme de tailles des particules composant les aérosols présents dans l'air pris en considération dans la problématique de santé humaine concernait principalement la plage des diamètres aérodynamiques compris entre environ $0.001\mu m$ et environ $100\mu m$. Ceci provient du fait que les aérosols émis présentent généralement une distribution en taille relativement dispersée.

Domaine épidémiologique : dans l'environnement et principalement en zone urbaine, les particules dispersées dans l'air ambiant sont de nature anthropogénique via les procédés de combustion et l'émission des véhicules à moteurs (Witschger & Fabriès, 2005). Il y a une dizaine d'années, l'hypothèse de "particule ultra-fine" a été formulée pour la première fois pour expliquer la relation observée entre l'accroissement significatif de problèmes respiratoires et cardiovasculaires et des épisodes de pollution particulaires élevée. Depuis lors, quelques études épidémiologiques récentes suggèrent, chez des personnes sensibles, une relation entre la concentration en particules ultra-fines dans l'air ambiant et des effets sur la santé humaine.

Domaine toxicologique : c'est dans ce domaine que de nombreuses études ont été publiées ces dernières années. La connaissance a fait un grand pas en avant en ce qui concerne les modes d'action des particules toxiques et les résultats actuels rendent maintenant plausible "l'hypothèse de particule ultra-fine". En particulier, il semble qu'actuellement les paramètres de "surface", de "taille" et de "morphologie" des particules ultra-fines constituent des paramètres clés.

2.2 Particules thérapeutiques

Selon l'Organisation Mondiale de la Santé (OMS), environ 300 millions de personnes souffrent d'asthme et autour de 255 000 personnes sont mortes de l'asthme en 2005. Il est prédit que les décès d'asthme augmenteront de 20% dans les 10 prochaines années si des mesures appropriées

ne sont pas prises.

Les particules d'aérosols présentes dans notre environnement sont de plus en plus identifiées comme étant des facteurs de risque pour la santé, mais les aérosols peuvent également être utilisés à des fins de diagnostic ou encore thérapeutiques pour soigner les affections pulmonaires. Les inhalateurs, par exemple, sont couramment utilisés pour administrer des médicaments (Dunbar & Hickey, 2001).

Dans les cas d'affections pulmonaires, l'administration de médicament par aérosol présente l'avantage d'atteindre directement la région affectée et le traitement nécessite ainsi des doses inférieures (les effets secondaires sont donc aussi minimisés).

3 Facteurs affectant le dépôt des particules

3.1 Complexité géométrique

Les particules inhalées doivent traverser la bouche, la gorge et les voies aériennes avant d'atteindre la zone du poumon alvéolaire qui pourrait bénéficier d'un traitement par aérosol. La complexité de la région buccale qui comprend des virages et des changements des sections transversales soudains induit un dépôt local considérable des médicaments. Les angles de ramification, le diamètre et la longueur de différents éléments de la région trachéo-bronchique influencent aussi le dépôt des particules. En outre, la géométrie des voies respiratoires est dépendante du temps et varie au cours du cycle d'inhalation-expiration. Enfin des différences considérables dans les détails géométriques existent entre les individus.

3.2 Taille de la particule

Un adulte respire en moyenne de 10 000 à 20 000 litres d'air par jour. L'air contient une très grande quantité de particules sous forme de micro-organismes, de poussières, de fumées, des allergènes, et d'autres aérosols toxiques ou non toxiques qui peuvent se déposer au cours

du processus d'inhalation et d'expiration. Le terme de dépôt total se réfère à la collection des particules dans l'ensemble des voies respiratoires, et le dépôt régional est spécifique à une région donnée. Les particules déposées peuvent avoir des effets différents, y compris de nombreuses maladies. Parfois des particules de taille et de quantité connues peuvent également être introduites intentionnellement par les voies respiratoires à usage thérapeutique (médicaments) ou pour des mesures des effets prophylactiques et thérapeutiques de substances inhalées par exemple. Le poumon a une très grande surface, il se prête donc à l'absorption des médicaments (en minimisant les effets secondaires) et l'absorption systémique (en utilisant un accès rapide dans le flux sanguin) fin. Pour toutes ces raisons, une détermination expérimentale et une prédiction théorique du dépôt total et régional sont nécessaires. Par conséquent, un vaste corpus de littérature s'est développé sur ce thème. Dans cette partie, nous présentons une synthèse des principales idées et des processus physiques appliqués aux dépôts dans les voies respiratoires.

La répartition du dépôt des particules inhalées est fortement déterminée par la taille des particules. La gamme des tailles de particules naturelles ou d'origine humaine peut être considérables. Par exemple :

- Les poussières professionnelles : $0.001-1\,000\mu m$
- Les particules de pollen : $20 - 60\mu m$
- Les produits en aérosols : $2 - 6\mu m$
- La plupart de particules de fumées des cigarettes : $0.2 - 0.6\mu m$
- Les virus et les protéines : $0.001 - 0.05\mu m$.

Une grande partie de ces particules déposées dans les conduits aériens sont éliminées par différents mécanismes tels que la toux, les éternuements, le transport muco-ciliaire et les mécanismes de clairance alvéolaire impliquant les macrophages pulmonaires et d'autres mécanismes (Brain & Valberg, 1979). Pour une simple description, Heyder et al. (1986) présentent les données du dépôt dans trois régions : la région extra-thoracique (Head Airways), la région trachéobronchiale (*TB*) et la région alvéolaire (alvéoli) (Fig. 1.2).

Le dépôt dépend des caractéristiques des particules (taille, forme, densité), de la morphologie du conduit aérien et du mode respiratoire (qui détermine le débit volumique et du temps de

séjour moyen d'une particule).

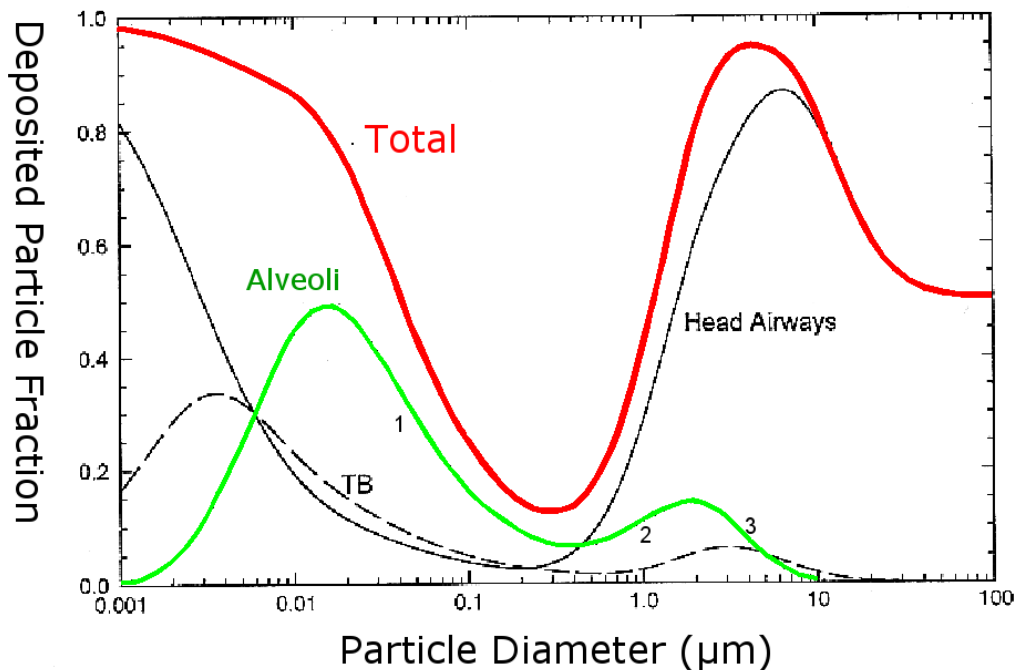


FIGURE 1.2 – Comportement du dépôt des particules inhalées dans les voies aériennes de l'homme (Taylor, 1996).

Les voies aériennes dans la **région extrathoracique** ou du nasopharynx sont très complexes de part leurs courbures importantes, les poils du nez, les sections transversales très étroites (qui entraînent une élévation de vitesse) et le débit d'air y est généralement turbulent. Ainsi, l'impact inertiel est le mécanisme dominant. En raison de l'augmentation du temps de relaxation avec la taille de la particule, le dépôt dû à l'impact inertiel augmente aussi avec la taille de la particule.

La Fig. 1.2 montre ce comportement qualitatif dans la région nasale :

- pour des particules de diamètre compris dans une gamme de 1 à $10\mu m$, la majorité des particules est déposée sur la paroi de la région nasale au passage de l'écoulement.
- pour des particules de diamètre supérieur à $10\mu m$, pratiquement toutes les particules sont déposées à la paroi.

Les données expérimentales pour la respiration buccale sont données par Heyder et al. (1986). Le dépôt total dû à une respiration nasale est plus élevé que par une respiration buccale, puisque les passages nasaux sont des collecteurs très efficaces, en particulier des grosses particules. Le

dépôt dans les régions laryngéale, bronchiale et alvéolaire sont les plus faibles pour la respiration nasale.

La courbe de dépôt dans les **régions du larynx et bronchiales** présente un maximum. Le rendement de ces régions, en fait, s'améliore en permanence avec l'augmentation du diamètre des particules. Toutefois, le dépôt des particules dans ces régions diminue en raison de la taille des particules évoquée ci-dessus, car un nombre de particules très réduit arrive à l'entrée de ces régions en raison du nombre considérable de particules déposés dans la région amont précédente (Fig. 1.2).

La courbe de dépôt dans la **région alvéolaire** montre trois types de segments (Fig. 1.2) :

- les particules sont si petites que la diffusion brownienne domine, le coefficient brownien de diffusion diminue avec l'augmentation du diamètre de particules, d'où la diminution du dépôt avec l'augmentation de la taille des particules (segment 1).
- la sédimentation gravitationnelle est devenue le mécanisme dominant, d'où l'augmentation du dépôt avec l'augmentation de la taille des particules (segment 2).
- dans une certaine gamme de tailles de particules, la fraction déposée diminue en raison de l'élimination accrue des particules (dû à l'impact inertiel et à la sédimentation gravitationnelle) dans les régions précédentes amont des voies respiratoires (segment 3).

Les trois principaux mécanismes de transport agissant sur les particules dans le système respiratoire sont l'impact dû à l'inertie des particules, la sédimentation due à l'accélération gravitationnelle et la diffusion due au mouvement brownien. Ces différents mécanismes influencent le dépôt total ainsi que le dépôt régional dans les voies aériennes humaines.

Impact inertiel : ce mode de dépôt dépend du diamètre et la vitesse des particules. Celles dont la taille est supérieure à $10 \mu m$ impactent la paroi de l'oropharynx tandis que les plus petites suivent leur chemin et s'enfoncent en profondeur dans l'arbre bronchique.

La sédimentation résultant de l'effet de la gravité. Elle affecte principalement des particules de petite taille (1 à $5 \mu m$) et ne concerne que les bronches et les alvéoles. Elle est maximale pour un débit d'air faible et peut être favorisée par une simple pause respiratoire à la fin de l'inspiration.

La diffusion ou mouvement brownien est due à l'agitation chaotique des petites particules (inférieures à $0.5\mu m$) qui subissent des collisions avec des molécules de gaz. Ce mode de dépôt est insignifiant puisque que 80% des particules de cette taille (inférieures à $0.5\mu m$) restent en suspension et puis sont éliminées lors de l'expiration (Katz et al., 2001).

Nous nous intéresserons essentiellement aux particules à forte densité dont la taille est comprise entre 1 et $10\mu m$.

3.3 Débit respiratoire

Le débit respiratoire affecte directement le transport et le dépôt des aérosols. Basé sur l'activité d'un individu, les débits d'inhalation sont grossièrement classés comme suit : la respiration lente ($15l/min$), la respiration normale ($30l/min$) et une respiration en activité ($60l/min$).

3.4 Dispositifs d'inhalation

Il existe actuellement trois types de dispositifs d'inhalation disponibles sur le marché. (a) un aérosol-doseur, (b) un inhalateur à poudre sèche et (c) les nébuliseurs. Ces dispositifs ont chacun leurs propres avantages / inconvénients sur la base des besoins individuels des patients :

(a) *Un aérosol-doseur* est également appelé "pression inhalateur-doseur" ou "inhalateur-doseur propulseur". Cet appareil manuel est représenté sur la Fig. 1.3(a). En appuyant sur la cartouche, elle libère une brume de médicaments qui est insufflée dans les poumons. La pMDI est actuellement le dispositif de distribution le plus couramment utilisé. Comme pour la plupart des appareils d'inhalation, seuls 10% -20% de la dose nominale atteint les voies respiratoires (Jayaraju, 2009). La plupart des recommandations suggèrent que les patients inhalent lentement et intégralement tout en tirant la dose du pMDI. Les difficultés les plus fréquentes avec la pMDI sont l'impossibilité de coordonner l'actionnement du dispositif d'inhalation et la cessation involontaire d'inhalation d'aérosols lorsque les particules atteignent les poumons. Un moyen d'éviter ce problème est de placer une entretoise (allant de 50 à 750 ml en volume) entre la pMDI et le patient de telle sorte que les particules puissent être inhalés par l'entretoise immédiatement

après que la pMDI soit actionnée. L'entretoise filtre également les grosses particules qui seraient autrement absorbées dans les voies aériennes supérieures.

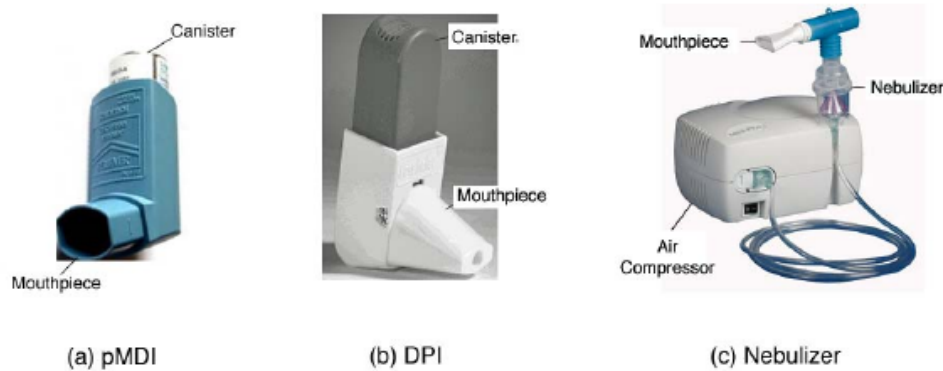


FIGURE 1.3 – Différents types d'inhalateurs.

(b) *Les inhalateurs de poudre sèche (DPI)*, comme les aérosols auto-déclenchés, sont des dispositifs plus faciles à utiliser car il n'y a pas besoin de coordonner l'appui et l'inspiration. La Fig. 1.3(b) montre une telle DPI très similaire à une pMDI, excepté la surface réduite de la sortie de bec. Les DPI sont parmi les dispositifs d'administration les plus récents, il suffit d'inspirer vite et une dose de produits est automatiquement délivrée. Il faut toutefois faire attention à ne pas expirer dans l'appareil lorsque vous videz vos poumons avant d'inspirer ou après avoir retenu votre souffle. Il faut également penser à amorcer une dose avant chaque inhalation, en tenant l'appareil bien droit selon les conseils du fabricant (verticalement ou horizontalement).

(c) *Les nébuliseurs* sont parmi les plus anciens des dispositifs d'inhalation. Un nébuliseur à jet typique est représenté sur la Fig. 1.3(c). Ces appareils ressemblent à une chambre d'inhalation avec un moteur qui permet de pulvériser un produit liquide en fines gouttelettes. Les nébuliseurs sont réservés principalement pour la livraison des grandes doses de bronchodilatateur au cours d'attaques d'asthme graves et pour les patients (nourrissons) incapables d'utiliser d'autres dispositifs d'inhalation. Il faut respirer de façon calme et régulière, pendant 10 minutes, à travers l'embout ou le masque (Cheng et al., 1999).

3.5 Conclusion

Les effets sur la santé humaine des particules inhalées dépendent de nombreux facteurs physiques et chimiques. Le plus important de ces facteurs est la taille des particules car celle-ci détermine le dépôt dans les conduits aériens et, au-delà, le comportement des particules dans le système biologique.

Les maladies respiratoires humaines représentent un sérieux problème dans notre société parmi lesquels le cancer est le plus mortel. Le système respiratoire, les voies aériennes et les poumons sont extrêmement complexes ce qui explique pourquoi il a été bio-mécaniquement peu enquêté. La première description morphologique des tubes bronchiaux humains est due à [Weibel \(1963\)](#) qui a introduit un modèle symétrique composé de 23 générations.

L'inhalation d'un aérosol implique son transport par l'air dans les voies respiratoires, au travers des conduits pulmonaires. Il convient donc de modéliser dans un premier temps le système aérien pulmonaire (i.e. ses propriétés physiologiques et mécaniques), puis d'étudier la physique de l'aérosol lui-même. On peut ensuite coupler les deux modèles pour étudier le dépôt d'aérosol dans l'arbre bronchique. De nombreux auteurs ont d'ailleurs déjà traité en détail le transport et le dépôt des particules ([Guha, 2008](#)). Il est important de pouvoir prédire numériquement le comportement dynamique des particules et leur dépôt dans des conduites cylindriques.

Chapitre 2

Revue bibliographique

La compréhension du transport et de dépôt des particules à travers le système des bronches demeure un objectif et un défi à réaliser en raison de la complexité de la géométrie des poumons humains. Peu de chercheurs ont réussi à simuler l'écoulement dans des modèles avec de nombreuses générations. Nous présentons dans ce chapitre les principaux travaux déjà réalisés au cours de ces dernières années sur ce thème.

1 Modèles CFD de dépôt d'aérosols dans les voies aériennes

Les descriptions morphologiques des tubes bronchiques de l'homme sont apparues dans la littérature depuis 1963, lorsque [Weibel \(1963\)](#) a introduit un modèle physique symétrique. [Horsfield & Cumming \(1968\)](#) ont par la suite proposé une représentation anatomique des tubes du poumon asymétrique en prenant le modèle de [Weibel \(1963\)](#) comme modèle de base. Deux types de modèles mathématiques asymétriques basés sur des données obtenues à partir des mesures d'un arbre humain ont été proposés par [Horsfield et al. \(1971\)](#). Ces modèles permettent de calculer les variables physiologiques tout en prenant en compte l'asymétrie de la géométrie. [Hammersley & Olson \(1992\)](#) ont présenté un modèle de bifurcations symétriques et asymétriques dans les poumons humains pour les générations de 6 à 12. Les premières études expérimentales sur un modèle à une seule bifurcation sont l'œuvre de [Zhao & Lieber \(1994\)](#) suivies par

des études numériques trois années plus tard (Fig. 2.1(c)). Comer, Kleinstreuer & Zhang (2001) ont présenté un modèle symétrique à double bifurcation des générations $G3$ - $G5$ (Fig. 2.1(b)) et Zhang, Kleinstreuer & Kim (2002) ont par la suite prolongé d'une génération supplémentaire au modèle de Comer, Kleinstreuer & Zhang (2001) (Fig. 2.1(d)). Hegedus et al. (2004) ont fourni une description mathématique détaillée des voies aériennes morphologiquement réalistes pour les cinq premières générations. Li et al. (2007c) ont réalisé un modèle hors-plan à l'aide des données de Horsfield & Cumming (1968) (Fig. 2.1(a)).

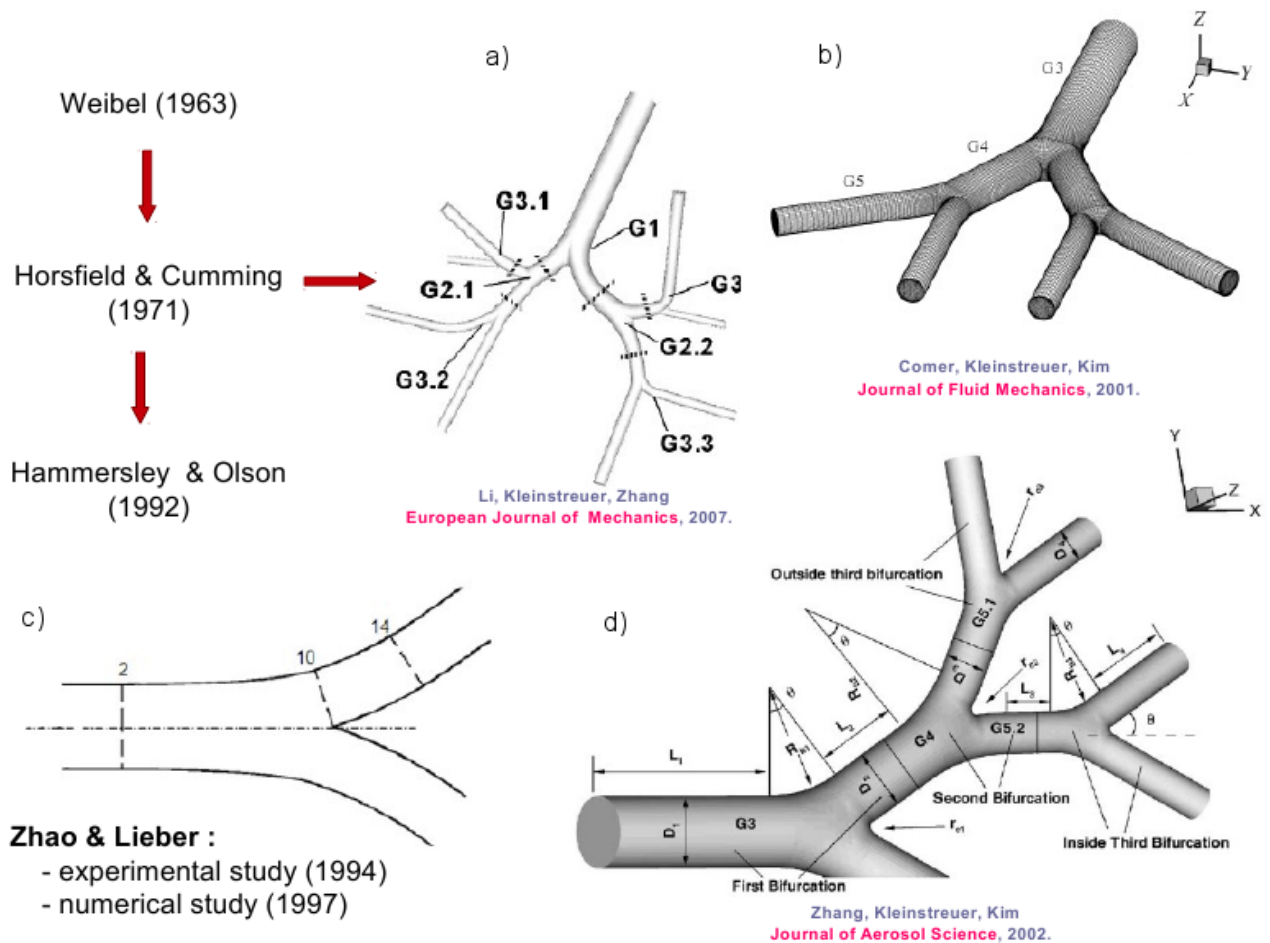


FIGURE 2.1 – Modèles dans la littérature.

Brodoy & Agnon (2007) se sont focalisés sur l'étude de l'effet de la morphologie du poumon sur l'hétérogénéité de la ventilation régionale et du dépôt des particules dans les bronches en utilisant le modèle de forme asymétrique régulière de Horsfield et al. (1971). Ils ont démontré que la variation du dépôt des particules dans les poumons ainsi que la variation de la ventilation

et les attributs morphologiques (les propriétés morphologiques et les processus physiologiques) augmentent modérément avec l'asymétrie de l'arbre pulmonaire.

Les voies respiratoires humaines peuvent être approchées comme un réseau de tubes de plusieurs bifurcations répétitives dont les dimensions diminuent progressivement (Weibel, 1963; Hammersley & Olson, 1992; Kaye & Phillips, 1997).

2 Caractéristiques de l'écoulement

Zhang & Papadakis (2010) ont étudié la modélisation numérique des écoulements bifurquant dans une voie aérienne humaine plane à simple bifurcation de deux générations $G10$ - $G11$.

- La Fig. 2.2 montre les résultats numériques de la vitesse axiale à trois sections différentes (voir Fig. 2.3) pour un nombre de Reynolds de 200. On voit que la différence dans les résultats numériques obtenus en utilisant des maillages différents est insignifiante. Par conséquent, une solution suffisamment précise peut être obtenue en utilisant $3,3 \cdot 10^5$ cellules.
- La Fig. 2.3 montre les contours de vitesse à mi-plan et les vecteurs vitesse axiale, comme observé par de nombreux auteurs (Zhao & Lieber, 1994; Comer, Kleinstreuer & Zhang, 2001), la vitesse maximale d'écoulement, après avoir passé la bifurcation, est biaisée asymétriquement en faveur de la paroi interne du cylindre-fille. Cette distribution de vitesse entraîne l'impact des particules sur la paroi interne. Les champs d'écoulement différents à la sortie du domaine sont susceptibles d'influencer le dépôt de particules dans les générations suivantes. En outre, aucune zone de recirculation observable ne se forme près de la zone de bifurcation pour cette configuration à simple bifurcation, comme indiqué sur la partie droite de la Fig. 2.3. Cela s'explique probablement par le faible nombre de Reynolds ($Re_{D_{inlet}} = 200$) et la géométrie. Comme indiqué dans Comer, Kleinstreuer & Zhang (2001) la zone de recirculation diminue avec la diminution du nombre de Reynolds. Il convient également de noter qu'aucune recirculation n'a été observée dans la validation géométrique de Zhao & Lieber (1994).

- La figure 2.4 montre les contours de la vitesse axiale et des vecteurs vitesse secondaire (les composantes de la vitesse parallèle au plan de la section transversale). La vitesse axiale maximale se trouve près de la paroi interne du cylindre-fille. Un vortex est formé dans le champ de vitesse secondaire, transportant l'écoulement à grande vitesse vers l'extérieur du tube et le débit à basse vitesse de l'extérieur vers l'intérieur le long du plan symétrique de la conduite. La figure 2.4 montre également que l'écoulement secondaire est plus fort en amont qu'en aval dans le cylindre-fille ($G11$).

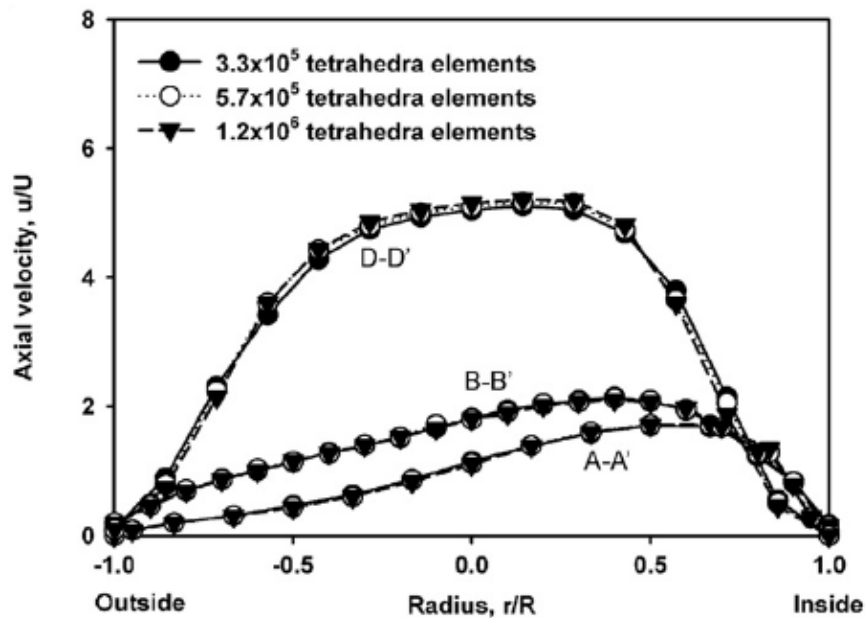


FIGURE 2.2 – Résultats numériques des profils de vitesse axiale à trois sections différentes définies dans la Fig. 2.3 (Zhang & Papadakis, 2010).

Liu et al. (2002) ont étudié la modélisation en 3D des écoulements bifurquant dans une voie aérienne plane et hors-plane à double bifurcation de trois génération $G5$ - $G7$.

- Les vecteurs flux secondaire à différentes sections pour un nombre de Reynolds $Re_{D_{inlet}} = 800$, sont montrées dans la Fig. 2.5 : cas du modèle plan : (a) au milieu de la branche de la deuxième génération, (b) au milieu de la branche externe de la troisième génération, (c) au milieu de la branche interne de la troisième génération ; cas du modèle hors-plan : (d) au milieu de la branche de la deuxième génération, (e) au milieu de la branche supérieure centrale de la troisième génération, et (f) au milieu de la branche inférieure de la

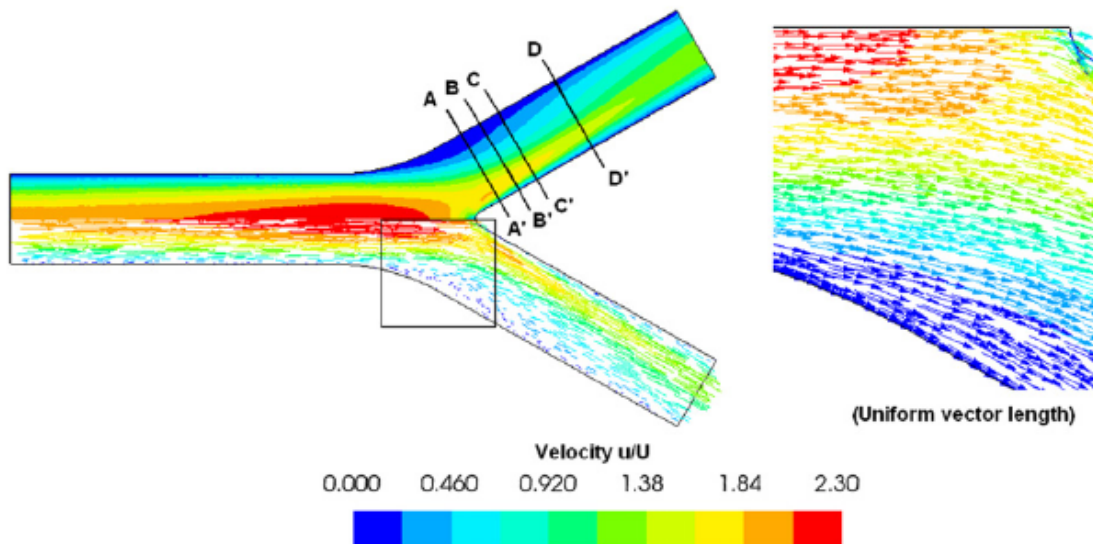


FIGURE 2.3 – Contours en $2D$ de vitesse axiale et vecteurs vitesses dans un modèle plan à simple bifurcation de génération ($G10-G11$) à $Re_{D_{inlet}} = 200$. La figure de droite montre les vecteurs vitesse dans la zone agrandie de la zone de bifurcation de débit (marqué par un rectangle dans la figure à gauche) (Zhang & Papadakis, 2010).

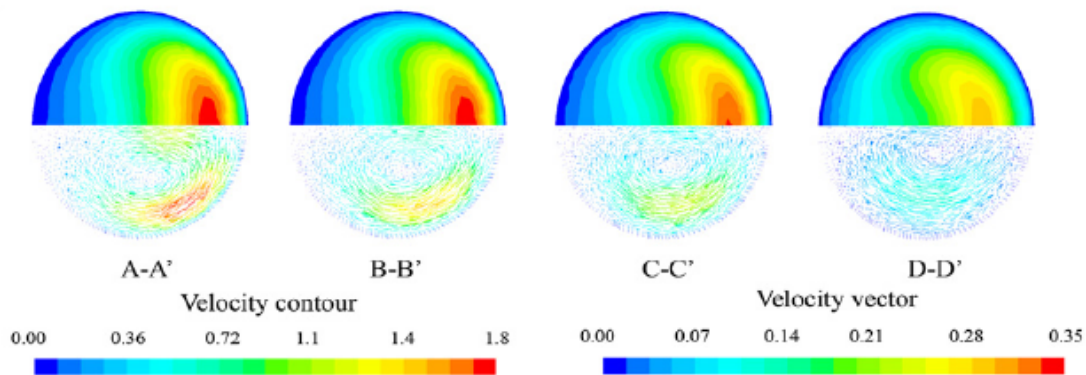


FIGURE 2.4 – Contours de la vitesse axiale et de vecteurs flux secondaire ($G10-G11$; $Re_{D_{inlet}} = 200$) (Zhang & Papadakis, 2010).

troisième génération (Liu et al., 2002). L'écoulement observé initialement dans la configuration plane (Fig. 2.5(b), (c)) change de direction juste en amont de la seconde bifurcation dans le cas du modèle hors-plan (Fig. 2.5(e), (f)). Cela est dû à l'orientation de l'angle.

– La Fig. 2.6 représente les profils de vitesse axiale à différentes sections pour trois nombres

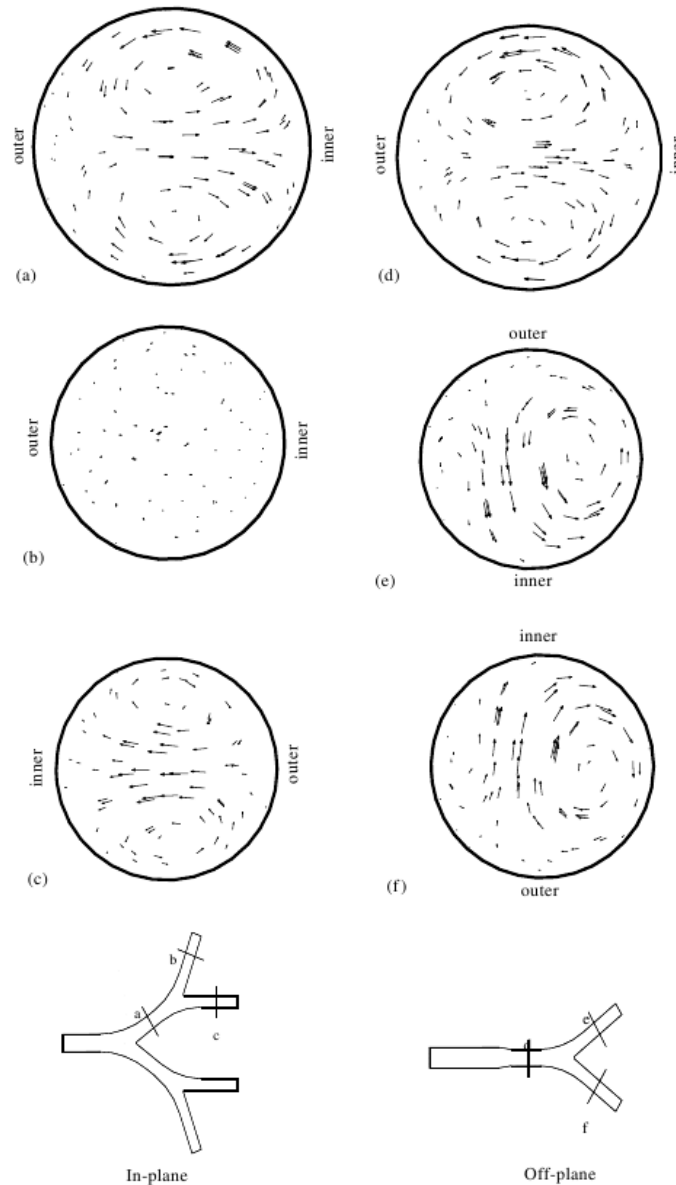


FIGURE 2.5 – Vecteurs flux secondaires dans deux modèles à double bifurcation de génération $G5$ - $G7$ (Liu et al., 2002)

de Reynolds. Les calculs de ces trois nombres de Reynolds suffisent pour illustrer l'effet de nombre de Reynolds $Re_{D_{inlet}}$. Différentes observations de profils de vitesses sont dressées : dans la configuration plane, au milieu de la branche de la deuxième génération $G6$ dans le plan de la bifurcation (Fig. 2.6(a)) et dans le plan transversal (Fig. 2.6(b)). Au milieu de la branche interne de la troisième génération $G7$ dans le plan transversal dans le cas du modèle plan (Fig. 2.6(c)) et dans le plan transversal dans le cas du modèle hors-plan

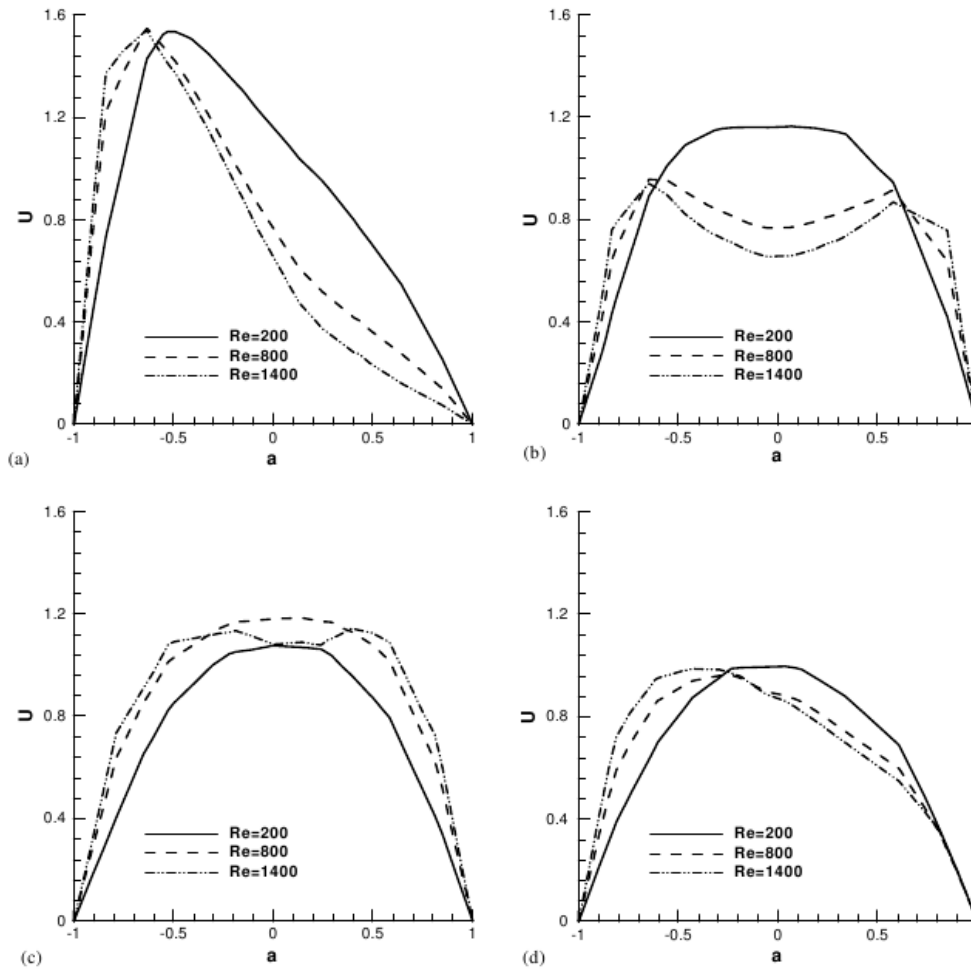


FIGURE 2.6 – Profils de vitesse axiale à différentes sections de $G5-G7$ (Liu et al., 2002).

(Fig. 2.6(d)). La géométrie joue un rôle non-négligeable.

- Le coefficient de perte de pression totale varie avec Re comme $C_p = Re^\beta$. L'exposant prend les valeurs de 0.464 et 0.497 pour les modèles hors-plan et plan, respectivement. Ces valeurs sont en bon accord avec la valeur $\beta = -0.5$ déterminée expérimentalement et sont meilleures que la valeur $\beta = -0.61$ calculée approximativement (Fig 2.7(a)).

Zhang, Liu, So & Phan-Thien (2002) ont étudié la variation de la chute de pression dans une voie aérienne humaine plane à double bifurcation de trois génération $G5-G7$ (voir la configuration plane citée plus-haut). Le coefficient de chute de pression totale varie en $Re^{-0.163}$ et $Re^{-0.480}$ pour un débit d'entrée en développement (écoulement uniforme) et entièrement développé (écoulement parabolique) respectivement. La relation obtenue à partir du débit d'entrée

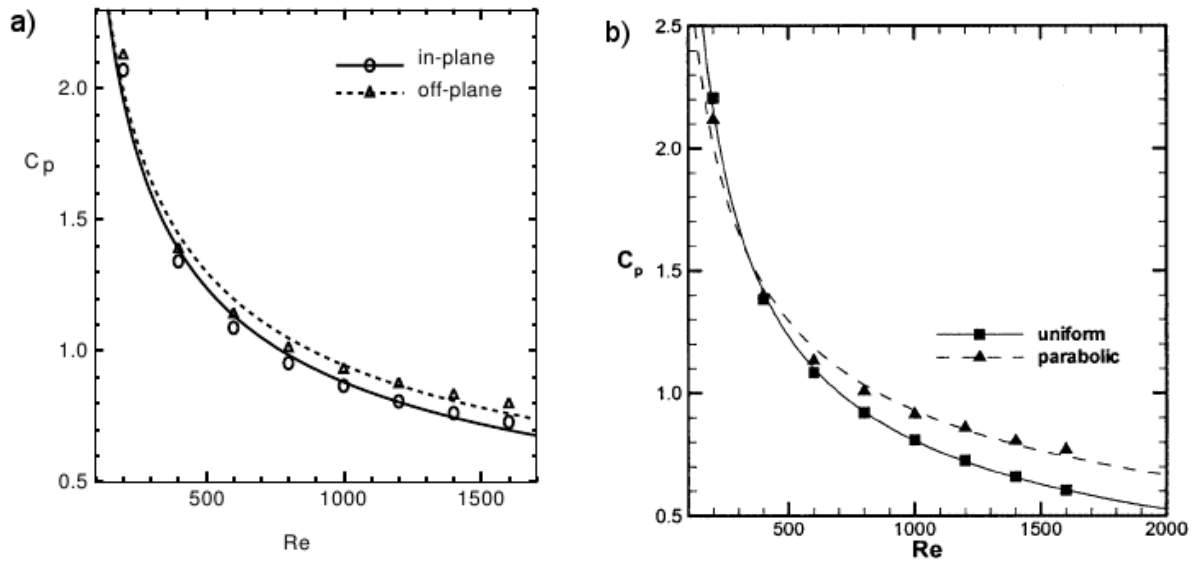


FIGURE 2.7 – Variations du coefficient de chute de pression en fonction du nombre de Reynolds : (a) comparaison de deux modèles (Liu et al., 2002) et (b) comparaison de deux types de profils de vitesses d'admission (Zhang, Liu, So & Phan-Thien, 2002).

pleinement développée est proche de la relation expérimentale $Re^{-0.5}$ (Fig. 2.7(b)).

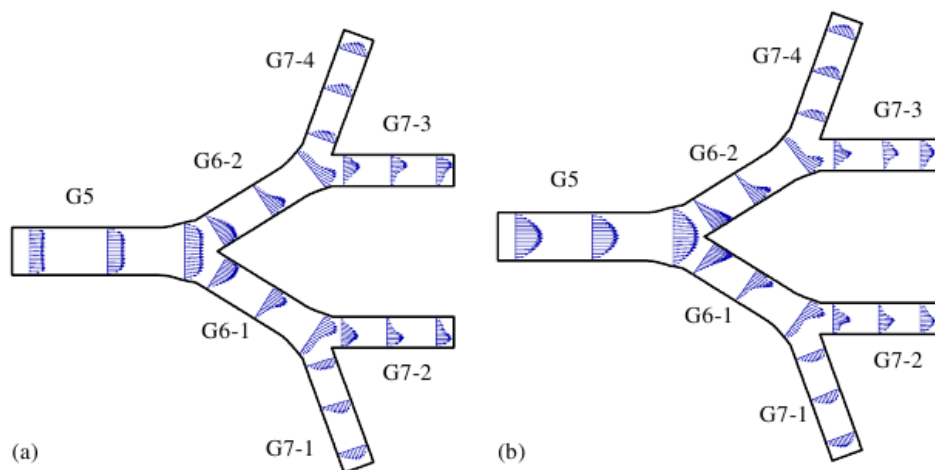


FIGURE 2.8 – Flux de vecteurs vitesse dans un modèle plan à triple génération (G5-G7) à $Re_{D_{inlet}} = 900$: (a) profil de vitesse d'entrée uniforme, (b) profil de vitesse d'entrée parabolique (Yang, Liu, So & Yang, 2006).

La maladie pulmonaire chronique obstructive est une des maladies les plus communes dans le monde et elle est causée par le blocage des voies aériennes dans le poumon qui résulte de l'inhalation de diverses sortes de polluants. Elle résulte d'une inflammation qui conduit à un rétrécissement et une obstruction des conduits aériens. L'obstruction peut d'une manière significative modifier l'écoulement respiratoire et le dépôt des particules. Afin de comprendre l'effet de l'obstruction sur l'écoulement d'air et le dépôt des particules, quatre modèles de quatre générations en 3D basés sur le modèle de 23-génération de Weibel (1963) sont générés. Les équations de Navier-Stokes laminaires, incompressibles en 3D sont résolues sur un maillage tétraédrique non-structuré (Yang, Luo & Liu, 2006; Yang et al., 2007).

Les voies aériennes obstruées ont une influence significative sur les branches-filles et entraînent une augmentation significative de la résistance de l'écoulement (Yang, Luo & Liu, 2006). Ces conduits obstrués modifient considérablement le champ d'écoulement. En effet, dans une bifurcation l'obstruction peut générer une recirculation en aval et en amont de l'écoulement. Les zones de recirculation bloquent l'air et l'empêchent de pénétrer dans les branches en aval ne permettant pas à l'oxygène d'atteindre les alvéoles pour un patient atteint de broncho-pneumopathie chronique obstructive (BPCO). L'obstruction d'une voie aérienne a une influence notable sur le dépôt des particules en aval de l'obstruction (Yang et al., 2007). Le profil de vitesse asymétrique dans la voie aérienne est modifié par la gorge et par conséquent de nombreuses particules impactent la cloison ce qui se traduit par une forte efficacité de dépôt.

Yang, Liu, So & Yang (2006) ont simulé numériquement l'écoulement dans les voies aériennes respiratoires dans des branches en 3D simplifiées de trois générations $G5-G7$ qui sont extraites à partir des branches du modèle de Weibel (1963). Les flux de vecteurs vitesses obtenus (Fig. 2.8(a) : profil de vitesse uniforme et Fig. 2.8(b) : profil de vitesse parabolique) ont été comparés à ceux obtenus avec les mêmes modèles mais obstrués (Yang, Liu, So & Yang, 2006). Les résultats ont montré que le profil de vitesse d'entrée imposé a une influence notable sur les modes d'écoulement et les chutes de pression dans les modèles symétriques ou obstrués. Le modèle à trois générations peut-être insuffisant pour étudier l'écoulement dans les bifurcations des voies aériennes obstruées, et un modèle de quatre générations ou plus est nécessaire pour obtenir de meilleurs résultats prédictifs.

Inthavonga et al. (2010) ont étudié les effets de l’asthme aigu sur une géométrie des voies aériennes réalistes, les modes de circulation d’air, la chute de pression, et leurs conséquences sur les administrations ciblées des médicaments. L’étude a montré que l’écoulement a une influence significative sur les caractéristiques de dépôt des particules dans les voies respiratoires ainsi que le rétrécissement des voies aériennes amplifie les effets de la courbure.

Keith Walters & William (2010) ont présenté une nouvelle méthodologie pour la simulation de dynamique des fluides numérique (*CFD*) de l’écoulement dans l’arbre broncho-pulmonaire de l’homme et ils ont fourni des résultats obtenus pour des modèles multi-générationnels basés sur la morphologie de Weibel (1963) et les données anatomiques de Hammersley & Olson (1992), “Modèles physiques des petites voies aériennes pulmonaires“. Par la suite, pour la résolution des équations de Navier-Stokes en trois dimensions dans ces régions des voies respiratoires, Keith Walters & William (2011) ont utilisé une méthode de simulation à grande échelle. La méthode est étendue à des simulations de transport et de dépôt des particules.

Comer, Kleinstreuer & Zhang (2001) ont démontré sur cette Fig. 2.9 l’importance de l’écoulement instationnaire cyclique sous une respiration en activité ($60l/min$) et son effet sur le transport et le dépôt des particules.

Afin de comprendre la dynamique du dépôt des particules c’est à dire les modes de dépôt locaux, les concentrations en surface, et l’efficacité de dépôt, il est important d’étudier avec précision les structures de l’écoulement pour une géométrie donnée avec des conditions d’entrée spécifiques (Comer, Kleinstreuer & Zhang, 2001; Zhang, Kleinstreuer & Kim, 2002).

3 Transport et dépôt des particules

Les particules inhalées de taille $1 \leq d_p \leq 10\mu m$ sont principalement déposés par impact inertiel en particulier dans la région trachéobronchiale en raison de leur grande taille (Kim et al., 1983; Gerrity & Herbert, 1979). Les caractéristiques détaillées du dépôt de ces particules polluantes sont d’une grande importance parce qu’elles sont liées à des maladies pulmonaires telles que l’inflammation des bronchioles, les blessures des tissus épithéliales et les tumeurs bronchiques, en

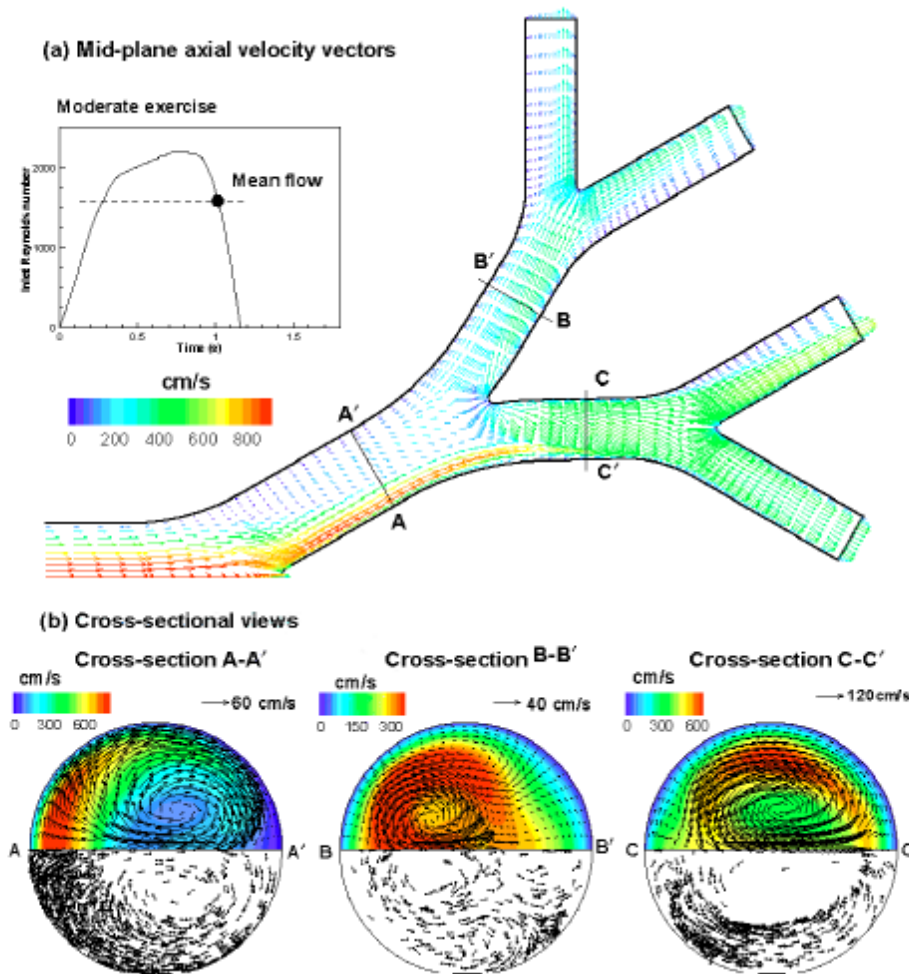


FIGURE 2.9 – Structures de l’écoulement et mouvement des particules en condition d’exercice modéré : (a) vecteurs de vitesse axiale dans le plan moyen, et (b) vues en coupe des contours vitesse axiale, vecteurs de l’écoulement secondaire ainsi que distributions des particules et directions d’écoulement (en bas). La moitié inférieure représente les vecteurs unitaires instantanées du mouvement des particules (Comer, Kleinstreuer & Zhang, 2001).

particulier dans un certain groupe de populations sensibles (Fox, 1993). En outre, des analyses numériques détaillées des voies aériennes multi-branches peuvent aider dans le développement de modèles globaux du poumon ainsi que dans l’administration optimale des médicaments. Plus précisément la complexité du poumon le rendant inaccessible à l’heure actuelle aux simulations numériques directes (ou aux études expérimentales) exige un développement de modèles faciles à utiliser. Sur ce thème, de nombreuses études expérimentales et numériques ont été développées.

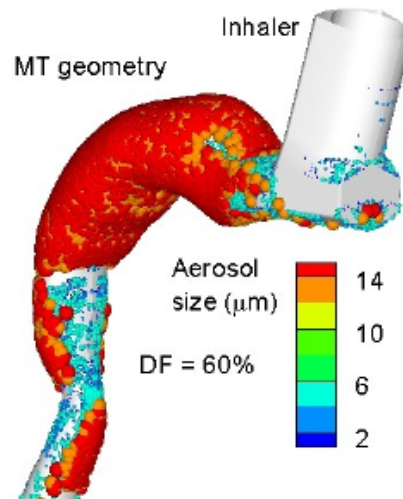


FIGURE 2.10 – Dépôt des particules dans un modèle bouche-gorge (Longest & Holbrook, 2011).

Kleinstreuer & Zhang (2003) ont développé un modèle simplifié de la bouche-gorge qui a été caractérisée par une voie aérienne courbée et de section circulaire sur la base des diamètres hydrauliques spécifiés par Cheng et al. (1999). Cette étude a montré une bonne concordance entre les données expérimentales de Cheng et al. (1999) en fonction de nombre de Stokes et les résultats numériques. Kleinstreuer & Zhang (2003) ont également montré l'importance des écoulements transitionnels et turbulents sur le dépôt de particules à travers des modèles des voies aériennes respiratoires orales. Zhang & Kleinstreuer (2003) ont utilisé ce modèle pour caractériser le transfert de chaleur et de masse. Zhang et al. (2005) ont cartographié les valeurs de dépôt localisé pour une gamme de débit et des tailles de particules dans le même modèle des voies respiratoires circulaires orales.

Des modèles spécifiques de la région bouche-gorge de patients ont été développés pour tenir compte de divers aspects liés aux dépôts d'aérosols en utilisant la modélisation *CFD*. Sosnowski et al. (2006, 2007) ont appliqué un modèle de patient spécifique de la région bouche-gorge pour caractériser les effets de l'écoulement non-stationnaire sur le dépôt des particules dans une gamme de taille de $0.3\text{-}10\ \mu\text{m}$. Cette étude a mis en évidence l'importance potentielle en temps de libération d'aérosols sur le dépôt dans les voies respiratoires extrathoraciques (Fig. 2.10).

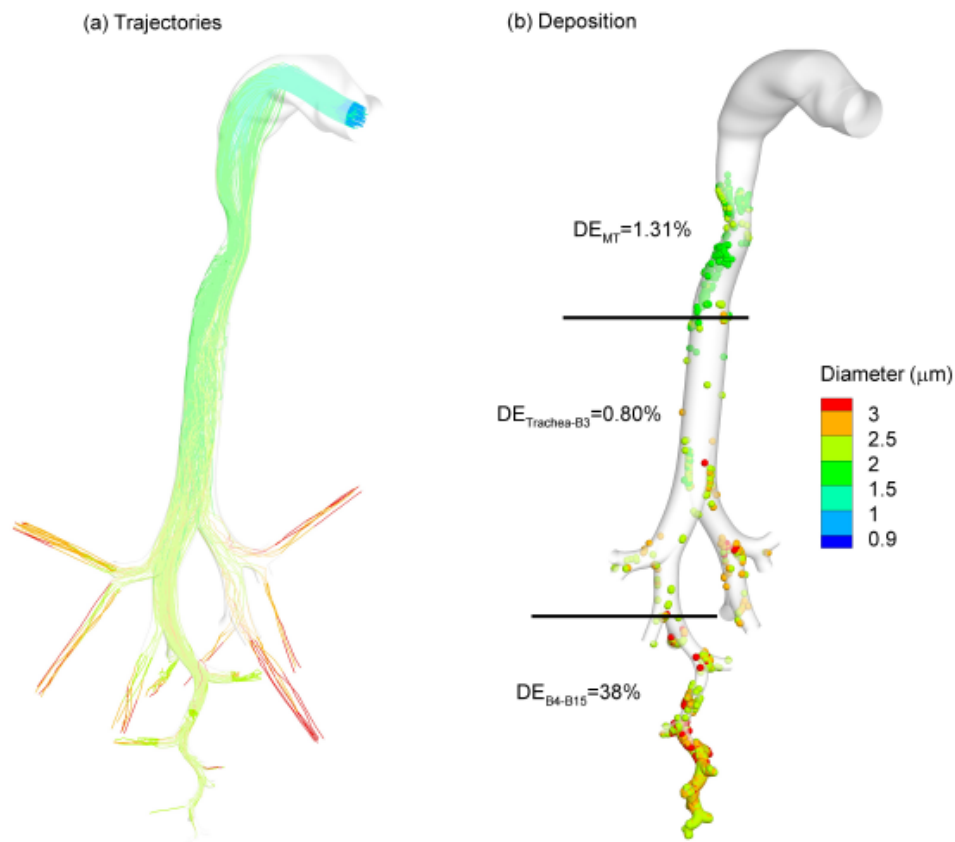


FIGURE 2.11 – Transport et dépôt des particules inhalées dans un modèle composé de bouche-gorge (MT) - trachéobronchéal (TB) : (a) les trajectoires et (b) de dépôt en fonction de la taille des particules (Tian et al., 2011).

Tian et al. (2011) ont récemment utilisé des simulations CFD dans un modèle qui s'étend de la bouche-gorge (MT) à la fin de la région trachéobronchique pour développer davantage le concept de transport et de dépôt des particules d'aérosols (Fig. 2.11). Les résultats ont montré que très peu de dépôt se produit dans le modèle bouche-gorge (MT) et dans la partie supérieure de (TB) (environ 1%). Le dépôt des particules de grandes tailles ($2.4 - 3.3\mu m$) a été observé à la sortie de la 5ème branche du modèle trachéobronchéal (Fig. 2.11(a)). Cette augmentation de la taille des particules a fourni un ordre de grandeur du dépôt dans les voies aériennes de la trachéobronchéale par rapport aux témoins, avec des rendements de dépôt d'environ 32 à 46% pour les conditions ECG (enhanced condensational growth) (Fig. 2.11(b)) basé sur le modèle

CFD.

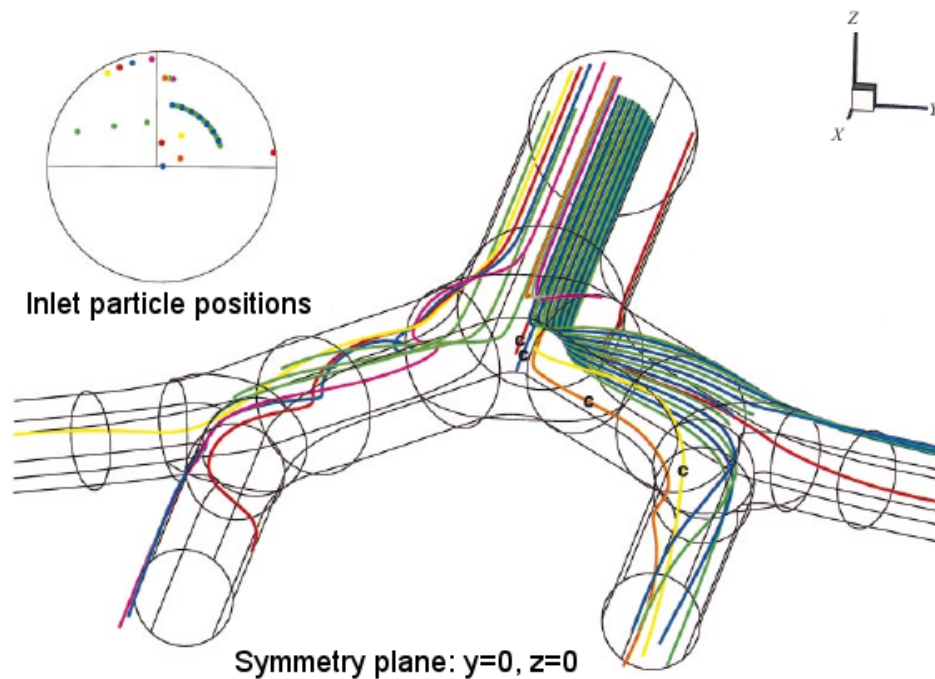


FIGURE 2.12 – Positions de quelques particules à l’entrée de la conduite d’admission et leurs trajectoires après libération (Comer, Kleinstreuer & Kim, 2001).

La Fig. 2.12 montre les positions et les trajectoires d’entrée de 26 particules ($d_p = 5\mu\text{m}$, $Re_{D_{inlet}} = 2000$ et $St = 0,12$). Quatre particules placées au centre (symbole c sur leurs lignes de trajectoire) sont suivies particulièrement, deux impactent au niveau de la première bifurcation, tandis que les deux autres sont déviées et sortent du système. Le maillage structuré utilisé dans ce modèle de calcul permet de suivre les positions et les trajectoires des particules.

La Fig. 2.13 montre la comparaison entre l’efficacité de dépôt (DE) pour deux nombres de Reynolds $Re_{D_{inlet}} = 500$ et 2000 . On voit que le facteur de géométrie a peu d’effet sur le DE pour les deux cas. Les formes arrondies au niveau des bifurcations ont peu d’effet sur l’efficacité de dépôt, mais peuvent influencer les modes de dépôt local des particules en raison de la modification géométrique.

L’ajustement empirique de Cheng et al. (1999) est indiqué dans la Fig. 2.14. Les données

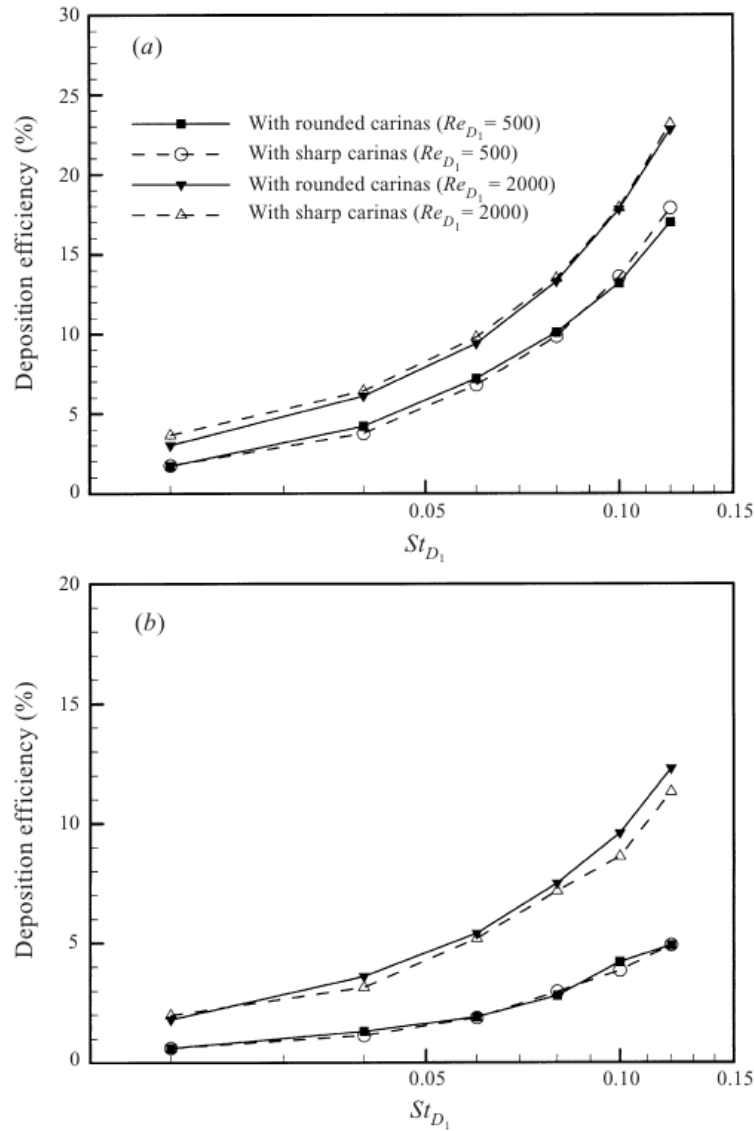


FIGURE 2.13 – Comparaison des efficacités de dépôt pour un modèle à double bifurcation : (a) première bifurcation et (b) seconde bifurcation (Comer, Kleinstreuer & Kim, 2001).

représentés par des cercles pleins sur la Fig. 2.14 sont des mesures obtenues expérimentalement par Cheng et al. (1999) avec trois débits différents (15, 30 et 60 l/min). Ils ont également représenté l'efficacité de dépôt mesurée en fonction du nombre de Stokes (Eq.4.15) (Fig. 2.15).

Il ressort de la fig. 2.15 que les données expérimentales tendent à se fondre en une courbe unique, même s'il y avait trois débits différents considérés. Ce n'est pas le cas lorsque l'efficacité de dépôt a été tout simplement représentée comme une fonction du paramètre d'impact (Fig.

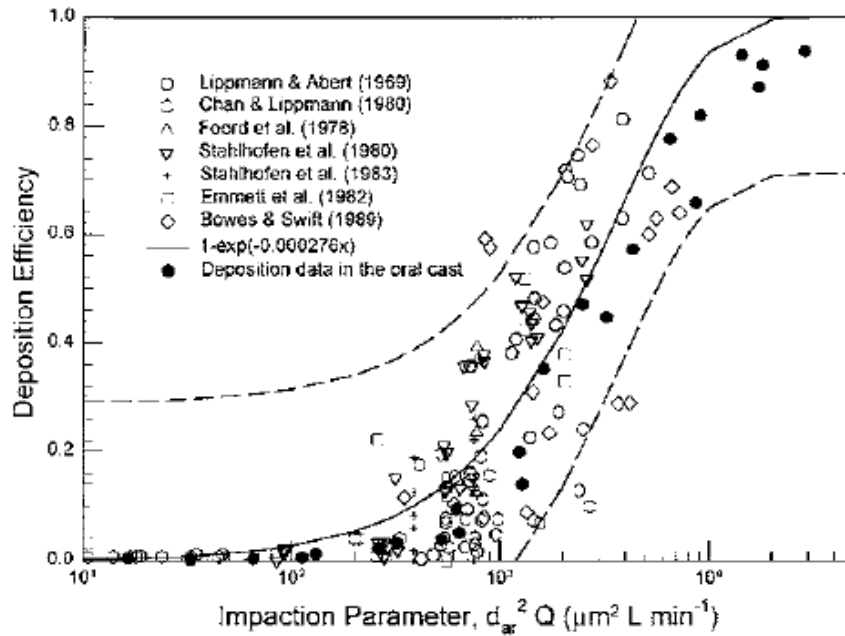


FIGURE 2.14 – Efficacités de dépôt des particules mesurées expérimentalement en fonction du paramètre d'impact (Cheng et al., 1999).

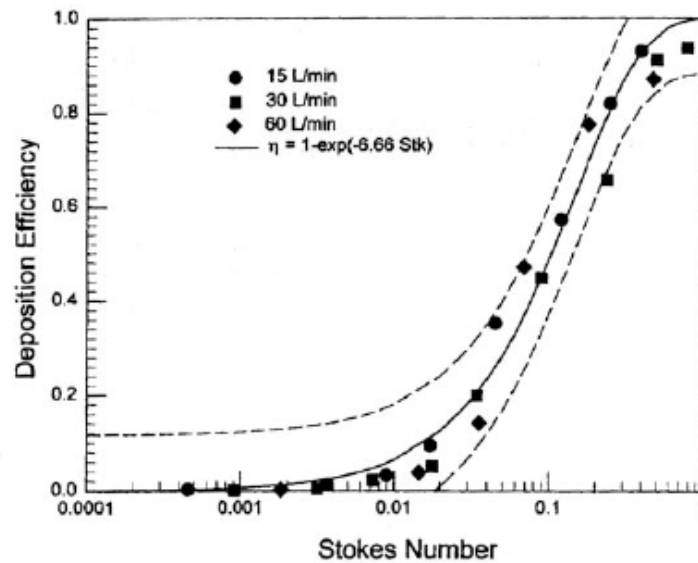


FIGURE 2.15 – Efficacités de dépôt des particules mesurées expérimentalement en fonction du nombre de Stokes (Cheng et al., 1999).

2.14) défini comme :

$$d_{ar}^2 \cdot Q [\mu m^2 L / min^2] \quad (2.1)$$

où Q est le débit et d_{ar} est le diamètre de la résistance aérodynamique définie par :

$$d_{ar} = d_{ae} C^{0.5} \quad (2.2)$$

où d_{ae} est le diamètre aérodynamique et C est le facteur de glissement (voir Eq.4.13).

La simulation des grandes échelles (large eddy simulation : *LES*) est capable de modéliser physiquement des écoulements transitionnels et turbulents dans un modèle simple de bifurcations asymétriques des voies aériennes (Luo et al., 2004). Elle peut constituer un outil utile dans la détermination de dépôt de particule dans la région supérieure des voies aériennes aussi pour des géométries plus réalistes.

Tian & Worth Longest (2010) ont développé et testé une condition aux limites qui peut être utilisée pour prédire l'absorption transitoire de vapeurs dans les simulations *CFD* de transport dans les voies respiratoires.

4 Conclusion

Ce chapitre nous a permis de faire le point sur les nombreux travaux menés à ce sujet mettant en évidence la diversité des méthodes pour étudier le comportement du transport et de dépôt des particules dans les voies aériennes supérieures humaines. Dans le cas d'un écoulement laminaire, l'ajout de particules au sein du champ fluide ne modifie pas le comportement dynamique (profils de vitesses) mais le transport des particules et l'efficacité de dépôt au niveau de la paroi dépendent de plusieurs facteurs. Il est donc important, de pouvoir prédire numériquement le comportement dynamique des particules et leur dépôt dans des conduites cylindriques. Dans le chapitre suivant, le processus physique responsable du mouvement et le dépôt des particules dans les voies aériennes sera discuté.

Chapitre 3

Les processus physiques de dépôt des particules dans les voies aériennes

Un aérosol est défini comme une suspension de particules liquides ou solides dans un milieu gazeux ayant une vitesse limite de chute négligeable. Dans les conditions normales de pression et de température, le terme de vitesse de chute libre permet de restreindre le domaine des tailles des particules aérosols entre $0.001\mu m$ et $100\mu m$. Les effets sur la santé humaine des particules inhalées dépendent de nombreux facteurs physiques et chimiques. La taille des particules représente le facteur le plus influent, car celle-ci détermine le dépôt dans les conduits aériens et, au-delà, le comportement des particules dans le système biologique. De nombreux auteurs ont déjà traité en détail les modélisations théoriques de différents processus physiques responsable du transport et de dépôt des particules d'aérosols dans les conduits aériens ([Guha, 2008](#)). Dans ce chapitre, l'état de l'art de différentes méthodes de calculs pour la détermination du mouvement de particules et leur dépôt sont discutés. Des écoulements laminaires dans les voies aériennes humaines sont considérés.

1 Caractéristiques des particules

1.1 Forme, diamètre et concentration des particules

La forme naturelle des particules solides varie de la sphère parfaite comme les pollens (Fig. 3.1(a)) jusqu'à la forme dite de bâtonnets comme pour les fibres minérales (amiantes) (Fig. 3.1(b)).

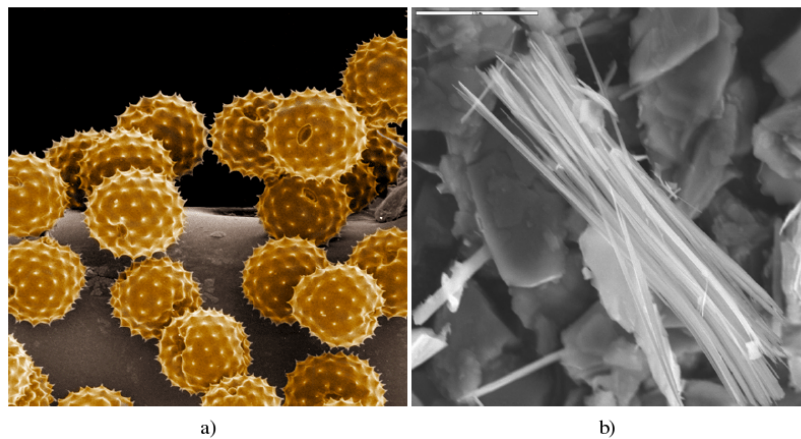


FIGURE 3.1 – Forme naturelle des aérosols : (a) pollens, la forme sphérique *parfaite* (taille de dizaines de μm) et (b) amiante, en forme de bâtonnets (échelle 10 μm) (Dénes Bejat, 2007).

Pour étudier les particules solides il est nécessaire de déterminer préalablement une dimension caractéristique qui nous permettra de décrire simplement la particule. Vu les formes irrégulières des particules, la détermination de cette dimension est très compliquée. Généralement on utilise comme dimension caractéristique un diamètre équivalent dont la définition varie selon les auteurs :

- diamètre de Martin : longueur moyenne d'une droite dans une direction fixée qui sépare la particule en deux surfaces ;
- diamètre de Feret : distance moyenne séparant deux points opposés de la particule, dans une direction fixe donnée ;
- diamètre projeté : diamètre d'une sphère possédant le même volume que la particule en

question (souvent utilisé à la place des diamètres de Feret ou de Martin).

Ces différents diamètres sont résumés dans la figure 3.2.

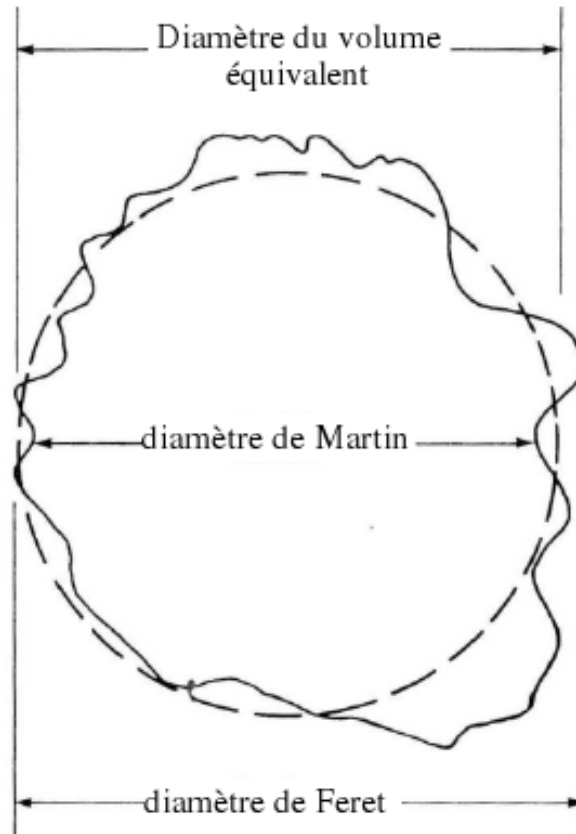


FIGURE 3.2 – Les différents diamètres caractéristiques couramment utilisés (Dénes Bejat, 2007).

Les autres diamètres généralement utilisés (diamètre du volume équivalent, diamètre de Stokes et diamètre aérodynamique) sont étudiés dans la section 2.3. Les diamètres utilisés habituellement ne fournissent pas une compréhension complète du comportement des particules de formes irrégulières. Il est alors intéressant de caractériser la forme des particules à l'aide de différents paramètres (Hervé-Bazin, 2007). Le comportement des particules dépend en général du produit $\rho_p \cdot d_p^2$ où ρ_p et d_p^2 sont la masse volumique et le diamètre de la particule, respectivement. Ceci est vrai dans la sédimentation gravitationnelle et les effets inertiels (voir en détail dans 2.3 et 2.4). Dans ce cas, il est préférable de définir un diamètre aérodynamique à l'aide de produit $\rho_p \cdot d_p^2$. Ce diamètre correspond au diamètre d'une sphère de masse volumique

$$\rho_p = 1g/cm^3.$$

Après avoir défini les dimensions spécifiques, la concentration locale doit être déterminée pour décrire convenablement la quantité des polluants. On a également plusieurs définitions de la concentration à notre disposition :

- concentration en nombres : nombre de particules par unité de volume du gaz, [*nombre*/ m^3];
- concentration ou densité volumique : volume des polluants par unité de volume du gaz, [sans dimension];
- concentration en masse ou masse volumique : masse des polluants par unité de volume du gaz, [kg/m^3].

1.2 Facteur de forme dynamique d'une particule

Les particules, rarement sphériques, sont généralement caractérisées par un diamètre équivalent, mais pour comprendre le comportement des particules de formes irrégulières, il est alors nécessaire d'étudier leur facteur de forme (χ) à l'aide de différents paramètres. Lorsqu'une particule a une vitesse relative par rapport au fluide porteur, le fluide exerce une résistance au mouvement de la particule (il y a apparition de force de traînée). Le facteur de forme se traduit alors par le rapport entre la force de traînée exercée sur la particule et celle exercée sur la sphère de même volume et de même vitesse relative par rapport au fluide porteur. Par exemple, le facteur de forme dynamique d'une particule sphérique vaut 1 et celui d'une particule non-sphérique est souvent supérieur à 1. Ce facteur dépend aussi de l'orientation de la particule considérée dans l'écoulement ([Hervé-Bazin, 2007](#)).

1.3 Temps de relaxation

Le temps de relaxation d'une particule τ_p se définit comme étant le temps caractéristique de réponse d'une particule à une sollicitation extérieure ([Petroff, 2005](#)). Son expression s'écrit :

$$\tau_p = \frac{\rho_p C_c}{18\mu} d_p^2 \quad (3.1)$$

où ρ_p est la masse volumique de la particule et C_c est le coefficient de Cunningham, définit plus loin. La forme adimensionnée de temps de relaxation est :

$$\tau^+ = \frac{\tau_p (u^*)^2}{\nu} \quad (3.2)$$

où u^* est la vitesse de friction du fluide sur une paroi et a pour expression :

$$u^* = \sqrt{\frac{\tau^*}{\rho}} \quad (3.3)$$

où ρ est la masse volumique du fluide et τ^* est la continuité de cisaillement à la paroi.

1.4 Libre parcours moyen

1.4.1 Cas des molécules de gaz

Dans le cas où l'on ne peut plus considérer l'air comme continu, on utilise le libre parcours moyen pour prendre en compte la distance entre les molécules d'air. On le définit comme la distance moyenne qu'une molécule de gaz parcourt entre deux collisions avec d'autres molécules de ce même gaz. Sur la figure 3.3(a), le libre parcours moyen d'un gaz est présenté. On peut le calculer selon la théorie cinétique des gaz ; une approximation pour les gaz mono-composante dont les molécules se comportent comme des sphères rigides est donnée ici :

$$\lambda_f = \frac{1}{\sqrt{2} n \pi d_m^2} \quad (3.4)$$

n représente le nombre de molécules par unité de volume, défini par la relation thermodynamique des gaz parfaits :

$$n = \frac{p}{k_f T} \quad (3.5)$$

avec k_f la constante de Boltzman et d_m est le diamètre de collision, par définition la distance entre les centres de deux molécules à l'instant de la collision. Dans les conditions normales de température et de pression atmosphérique, $\lambda_f = 0.065 \mu m$.

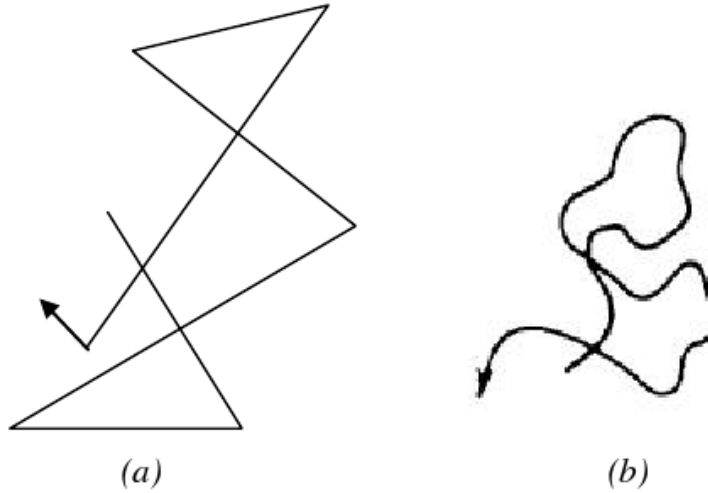


FIGURE 3.3 – Libre parcours moyen (a) d'une molécule de gaz et (b) du centre d'une particule (Dénes Bejat, 2007).

1.4.2 Cas des particules

Le libre parcours moyen d'une particule est déduit d'une courbe (Fig. 3.3(b)). Le mouvement d'une particule est en effet considéré comme continu. Pour cette raison, la définition du parcours moyen d'une particule est différente de celle du libre parcours moyen d'une molécule ; on le définit par la formule :

$$\lambda_p = \tau_p \bar{v} \quad (3.6)$$

où τ_p est le temps de relaxation de la particule et \bar{v} est la vitesse moyenne d'agitation, qui est la vitesse de la particule juste après le choc d'une molécule sur sa surface, et qui s'écrit de la manière suivante (Dénes Bejat, 2007), (Hinds, 1982) :

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{8k_f T}{\pi m}} \quad (3.7)$$

ou bien

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{48k_f T}{\pi^2 \rho_p d_p^3}} \quad (3.8)$$

où m est la masse de la particule. λ_p correspond approximativement à la distance caractéristique parcourue entre deux changements de direction (Fig. 3.4).

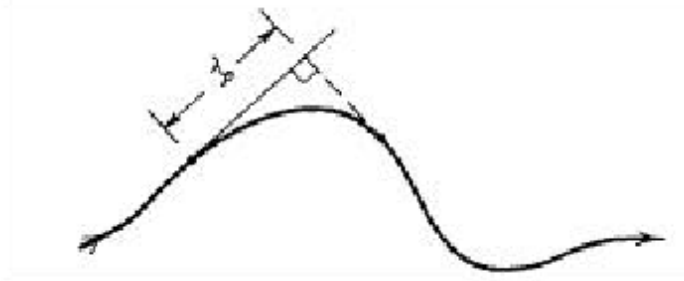


FIGURE 3.4 – Définition géométrique du libre parcours moyen d'une particule (Dénes Bejat, 2007).

1.5 Domaine moléculaire

Le domaine de dimension des particules qui peuvent composer un aérosol est compris en général entre quelques dixièmes de nanomètres jusqu'à cent micromètres. Pour déterminer la résistance du milieu gazeux au mouvement d'une particule, on se réfère au nombre adimensionnée de Knudsen (K_n) qui caractérise la continuité du milieu par rapport à la particule. Ce nombre se définit comme le rapport entre le libre parcours moyen des molécules (λ_f) qui composent le fluide (air) et le rayon des particules transportées, supposées sphériques r_p .

$$K_n = \frac{\lambda_f}{r_p} \quad (3.9)$$

Ainsi, trois types de régime se présentent :

- si $K_n \ll 1$, le milieu est dit continu, on peut alors exprimer la résistance du milieu au mouvement d'une particule en fonction des paramètres macroscopiques du fluide gaz (masse volumique ρ , viscosité dynamique μ).
- si $K_n \simeq 1$ (en pratique $0.4 < K_n < 20$), le domaine est appelé domaine intermédiaire.

- si $K_n \gg 1$, le milieu est dit discontinu, c'est le domaine moléculaire. Les particules sont soumises au mouvement brownien car le mouvement d'une particule est affecté en permanence par les collisions individuelles avec les molécules du fluide gazeux environnant. La résistance du milieu au mouvement d'une particule est alors fonction de l'agitation thermique, de la masse et de la concentration des molécules du gaz.

2 Mouvement des particules et forces associées

2.1 La force de traînée

La force de traînée qui agit sur une particule est due à l'accélération du fluide qui a été déplacé par la particule durant son mouvement. La première expression de cette force a été donnée par Newton pour un régime de nombre de Reynolds de la particule supérieur à 1 000 défini par :

$$Re_p = \frac{(v - v_p)d_p}{\nu} \quad (3.10)$$

où $(v - v_p)$ est la vitesse de glissement et ν la viscosité cinématique. Pour cet intervalle, l'expression de la force est la suivante :

$$F_D = C_D \cdot \frac{\pi d_p^2}{4} \cdot \rho_f \cdot \frac{(v - v_p)^2}{2} \quad (3.11)$$

Cette expression varie selon le régime de l'écoulement et suivant la taille des particules mais dans le régime où Re_p est supérieur à 1 000, qui porte le nom de *régime newtonien*, l'expression reste valable. Quand le nombre de Reynolds de la particule est inférieur à 1 000, on quitte la zone newtonienne et on arrive dans un régime de transition.

Si le nombre de Reynolds de la particule est compris entre 1 et 200, on peut utiliser l'expression du coefficient de traînée approximée par :

$$C_D = \frac{24}{Re_p} \left(1 + \frac{Re_p^{\frac{2}{3}}}{6}\right) \quad (3.12)$$

Entre 200 et 1 000 la traînée est marquée par la transition à la turbulence Pour $Re_p=1\ 000$ le modèle donne $C_D = 0.36$ qui est inférieur à C_D du turbulent (Fig. 3.5). Dans le cas où le nombre de Reynolds de la particule est inférieur à 1, la valeur de C_D varie selon une autre relation. C'est le régime de Stokes et l'expression du coefficient de traînée est :

$$C_D = \frac{24}{Re_p} \quad (3.13)$$

Ce domaine d'écoulement de *Régime de Stokes* (Fig. 3.5) se distingue des deux autres par le fait qu'ici les effets d'inertie sont négligeables alors que les effets visqueux sont très importants. Comme le nombre de Reynolds représente le rapport entre la force d'inertie et la force visqueuse, si on augmente l'effet de viscosité en diminuant l'effet d'inertie, le nombre de Reynolds tend vers zéro. La loi de Stokes est déduite de la force de traînée de Stokes :

$$F_D = 3\pi\mu(v - v_p)d_p \quad (3.14)$$

où on considère que la vitesse du fluide est zéro à la surface de la particule (condition d'adhérence), qu'il n'y a pas de paroi dans un voisinage de 10 diamètres autour d'une particule et que l'écoulement est décrit par les équations de Stokes. En effet, compte tenu de la définition du coefficient de traînée :

$$C_D = \frac{3\pi\mu(v - v_p)d_p}{\rho \frac{\pi}{8} d_p^2 (v - v_p)^2} = \frac{24\mu}{\rho(v - v_p)d_p} = \frac{24}{Re_p} \quad (3.15)$$

Dans le régime de Stokes, on a considéré que la vitesse du fluide était égale à zéro à la surface de la particule. Cette hypothèse n'est plus valable pour le cas de petites particules dont la taille

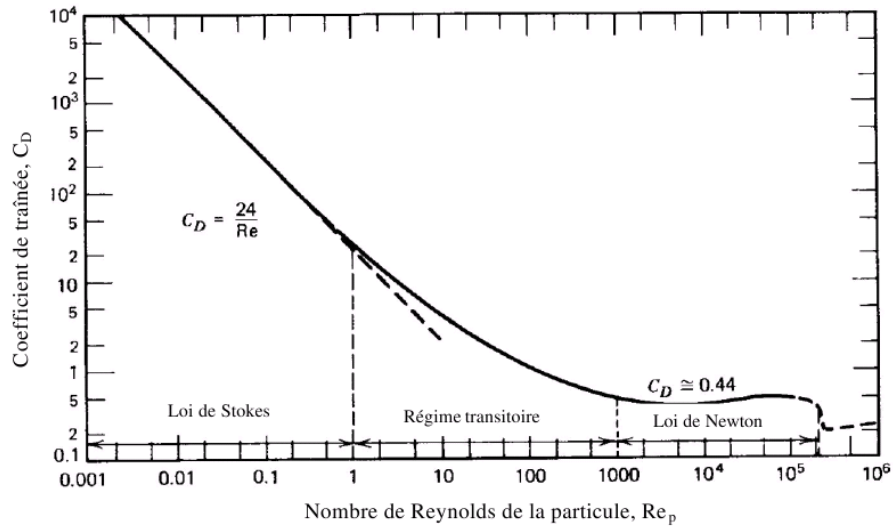


FIGURE 3.5 – Coefficient de traînée en fonction du nombre de Reynolds de la particule (Dénes Bejat, 2007).

s'approche du libre parcours moyen du gaz. C'est à dire que l'espace libre entre les molécules de gaz est comparable à la taille de la particule. Pour prendre en compte cette erreur, Cunningham a développé, pour la loi de Stokes, un coefficient permettant de corriger la valeur de la force de traînée "Coefficient de Cunningham (Fig. 3.6)" :

$$C_c = 1 + \frac{2\lambda_f}{d_p} [1.142 + 0.058 \exp(-0.999 \frac{d_p}{2\lambda_f})] \quad (3.16)$$

où λ_f est le libre parcours moyen d'une molécule du gaz. Ce coefficient est toujours supérieur à 1 et tend à diminuer la valeur de la force de traînée selon la formule :

$$F_D = \frac{3\pi\mu(v - v_p)d_p}{C_c} \quad (3.17)$$

La figure 3.6 montre d'une part que la valeur de C_c ne devient significative que pour les particules de taille inférieure à $1\mu m$, et d'autre part que la valeur augmente quand la taille des particules diminue. Ce coefficient exprime le fait qu'avec la diminution de la taille des

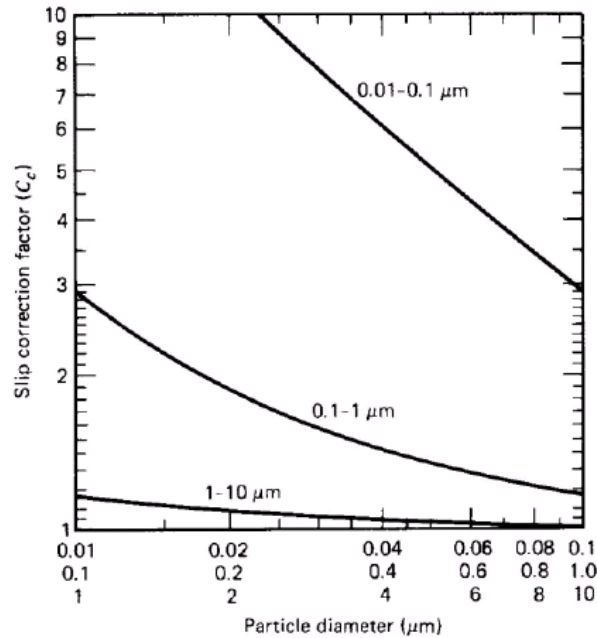


FIGURE 3.6 – Coefficient de Cunningham à 293K et à la pression atmosphérique (Dénes Bejat, 2007).

particules, la force de traînée diminue plus vite que ce que l'on pouvait s'attendre en observant la diminution de la taille des particules. En négligeant ce coefficient, on sous-estimerait la vitesse de dépôt des particules.

2.2 La diffusion brownienne

Les particules considérées très fines (de taille inférieure au dixième de micron) sont mises en mouvement par les molécules du fluide porteur soumises à l'agitation thermique. A plus grande échelle, le phénomène est décrit par la loi de Fick (Guha, 2008), qui permet d'exprimer le flux de particules en fonction de leur coefficient de diffusion et de leur concentration. Le coefficient de diffusivité brownienne D_b d'une particule de rayon r_p est donnée par :

$$D_b = \left(\frac{k_f T}{6\mu_a r_p} \right) C_c \quad (3.18)$$

où k_f est la constante de Boltzman, T est la température absolue du gaz, μ_a est la viscosité dynamique de l'air et C_c est le facteur de correction de Cunningham. On introduit ce facteur

pour décrire la résistance du milieu au mouvement d'une particule considérée.

2.3 La gravitation

Une particule en chute libre est soumise à la gravité de la pesanteur, à la poussée d'Archimède et à la force de traînée. Lorsque l'équilibre de toutes ces forces est atteint, la vitesse limite de la particule est appelée vitesse terminale de chute ou vitesse de sédimentation v_s et s'exprime en fonction du temps de relaxation τ_p (Abadie, 2000), soit :

$$v_s = g \cdot \tau_p \quad (3.19)$$

où $g(m/s^2)$ représente l'accélération de la pesanteur. Soit encore avec l'expression de τ_p (voir équation 2.1) :

$$v_s = g \cdot \frac{\rho_p d_p^2 C_c(d_p)}{18\mu} \quad (3.20)$$

Cette relation est valable, si le nombre de Reynolds de la particule sphérique est inférieure à 0.1.

Si par contre, les particules en mouvement sont considérées non sphériques, le diamètre équivalent en volume de la particule est utilisé, soit l'expression de v_s :

$$v_s = g \cdot \frac{\rho_p d_e^2 C_c(d_e)}{18\mu\chi} \quad (3.21)$$

où d_e représente le diamètre de la sphère qui a le même volume que la particule considérée et χ est le facteur de forme dynamique de cette même particule. Lorsqu'on étudie les particules d'aérosols, en physique par exemple, on utilise généralement le diamètre aérodynamique équivalent (d_{ae}) d'une particule. Il est défini comme le diamètre de la sphère de masse volumique de référence ($\rho_p = 1g/cm^3$) et de même vitesse de sédimentation que la particule. Ainsi, l'expression de la vitesse de sédimentation d'une particule quelconque est donnée par :

$$v_s = g \cdot \frac{\rho_p d_{ae}^2 C_c(d_{ae})}{18\mu} \quad (3.22)$$

avec $\rho_p = 1\text{g/cm}^3$ On utilise également, pour exprimer cette vitesse de sédimentation, le diamètre de Stokes (d_s). Il est défini comme le diamètre de la particule de même masse volumique ρ_p et de même vitesse limite de sédimentation que la particule considérée. L'expression de v_s est donnée par :

$$v_s = g \cdot \frac{\rho_p d_s^2 C_c(d_s)}{18\mu} \quad (3.23)$$

Ces trois types de diamètres qui interviennent dans les expressions de la vitesse de sédimentation sont résumés sur la figure 3.7 ci-dessous.

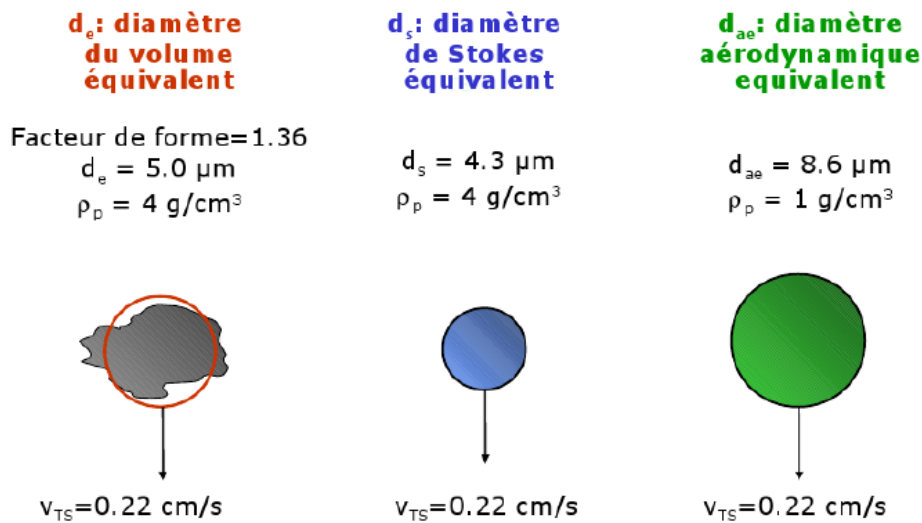


FIGURE 3.7 – Schéma descriptif de différents diamètres équivalents (Hinds, 1999).

L'influence de la sédimentation s'exerce à la fois sur le transport et le dépôt des particules.

2.4 L'impact inertiel

L'influence de l'inertie de la particule se fait sentir lorsque la taille des aérosols est supérieure à quelques microns ($d_p = 5\mu\text{m}$ pour cette étude).

Une particule, transportée par un écoulement d'air de vitesse moyenne v_f dans une enceinte vers un obstacle (bifurcation de paroi) de dimension caractéristique L , peut, lorsque son inertie

est trop grande, être déviée de la trajectoire de l'écoulement d'air et impacter la paroi au niveau de la bifurcation (Fig. 3.8).

Classiquement la description de ce phénomène se fait par l'introduction d'une efficacité de dépôt, DE . Elle représente le ratio entre le nombre des particules déposées à l'obstacle et le nombre des particules admise au départ. Elle se définit donc par rapport à la surface projetée de l'obstacle dans le plan perpendiculaire à l'écoulement amont.

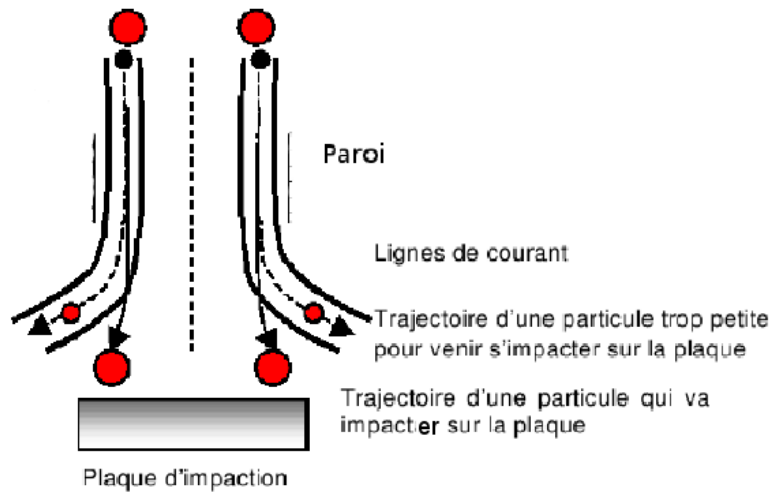


FIGURE 3.8 – Collection des particules par impact inertiel

L'efficacité de dépôt (DE) est liée au nombre de Stokes par une relation qui dépend entre autre de la forme de l'obstacle (Petroff, 2005). Le nombre de Stokes St quantifie l'importance relative de l'inertie de la particule et de la convection par l'écoulement moyen. Il s'exprime en fonction du temps de relaxation de la particule τ_p , la vitesse du fluide amont v_f et la dimension caractéristique du diamètre D de la conduite, soit :

$$St = \frac{\tau_p \cdot v_f}{D} \quad (3.24)$$

2.5 La force de portance

La force de portance est orientée perpendiculairement au mouvement relatif de la particule. Elle prend naissance de deux phénomènes bien distinct :

- d’une part, la particule possède une rotation propre qui provoque ce que l’on appelle “**effet Magnus**”.
- d’autre part, la particule se déplace dans un écoulement cisailé (important au voisinage de la paroi) : “**effet Saffman**”.

- Portance due à la rotation : **effet Magnus** Lorsqu’une particule en rotation se déplace dans un écoulement de fluide, elle va par frottement modifier la vitesse du fluide autour d’elle. D’une part la particule entraîne le fluide qui sera accéléré : de ce côté la pression diminue. D’autre part, la particule freine l’écoulement et la pression augmente. Cette dissymétrie fait que la particule se déplace du côté de la plus faible pression, perpendiculairement à la direction du fluide, à cause de la force de portance dans cette direction (Fig. 3.9). Ce phénomène, observé par le physicien allemand Heinrich Gustav Magnus (1802-1870), porte son nom, **effet Magnus**. On parle aussi d’effet **Robins**.

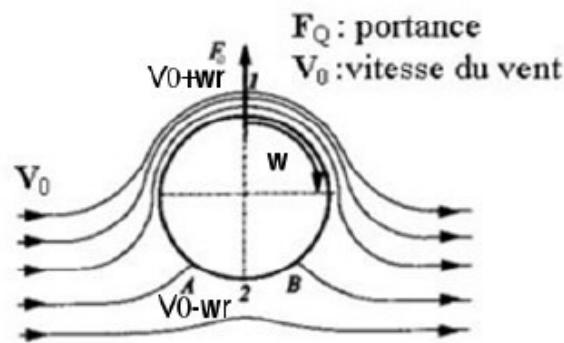


FIGURE 3.9 – Effet Magnus autour d’une particule en rotation (El Akoury, 2007)

L’équation de Bernoulli s’écrit pour un fluide parfait :

$$\frac{\rho V_1^2}{2} + P_1 = \frac{\rho V_2^2}{2} + P_2 \quad (3.25)$$

La différence de vitesse entre les points (1) et (2) est donc à l’origine d’un gradient de pression entre ces deux points :

$$P_1 - P_2 = \frac{\rho(V_2^2 - V_1^2)}{2} = 2\rho\omega r V_0 \quad (3.26)$$

où ω est la vitesse de rotation, V_0 la vitesse du fluide à l'infini et r le rayon du cylindre. Ce gradient de pression génère donc une force de Magnus. En tenant compte de la théorie asymptotique de Moore (1957) (El Akoury, 2007), la circulation dans le cas d'un fluide parfait peut s'écrire :

$$\Gamma = 2\pi V r = 2\pi\omega r^2 \quad (3.27)$$

Le coefficient de portance théorique pour un fluide parfait est alors donné par :

$$C_{port} = \frac{2\Gamma}{2VR} = 2\pi \frac{\omega r}{V_0} = 2\pi\alpha \quad (3.28)$$

avec

$$\alpha = \frac{\omega r}{V_0} \quad (3.29)$$

étant le taux de rotation.

L'effet Magnus explique à titre d'exemple la trajectoire du ballon lors d'un tir de coup-franc en football ou d'une balle de tennis. En effet, pour une rotation d'arrière en avant (axe horizontal perpendiculaire au mouvement, comme une balle roulant sur le sol), la balle plongera plus vite vers le sol ; dans le cas contraire, elle sera soulevée et volera plus loin avant de toucher le sol.

- Portance induite par cisaillement : **effet Saffman**

Saffman (1965, 1968) a fourni une expression pour la force de portance (par unité de masse et dans la direction y) induite par cisaillement. Les calculs ont montré que l'effet de la force augmente la vitesse de dépôt. La majorité des calculs de dépôt rapportés dans la littérature fait usage de l'expression de Saffman pour la force de portance. Toutefois, Saffman a dérivé son résultat pour un écoulement de cisaillement. Pour les calculs de dépôt, il faut utiliser des expressions modifiées pour la force de portance qui incluent les effets de la proximité d'une paroi et d'un nombre de Reynolds fini. Le signe de la force de portance dans une direction particulière

dépend du signe de la vitesse du glissement dans la direction perpendiculaire (Guha, 2008).

$$F_{Sy} = 1.54 \frac{\rho_p \nu}{\rho_p r} \sqrt{\frac{1}{\nu} \left| \frac{dV_{fx}}{dy} \right|} (V_{fx} - V_{px}) \quad (3.30)$$

2.6 La turbophorèse

La migration due au gradient de l'intensité de turbulence influence le dépôt des particules. Ce phénomène, appelé "turbophorèse" par Reeks en 1983, se produit en général dans les écoulements turbulents quand le transport des particules se fait par convection et par ce phénomène les particules sont déplacées dans la direction opposée au gradient de la turbulence. Ainsi, dans les régions où la turbulence est très intense, les particules sont "jetées" vers les régions les plus calmes où il y a moins de mouvement turbulent.

Dans les trois sections suivantes, nous allons nous intéresser aux forces (thermophorèse, diffusiphorèse et électriques) qui apparaissent à cause des interactions asymétriques des molécules de gaz avec la particule dans un gradient de température ou de concentration donné. Toutes ces forces sont très faibles et ne causent le mouvement des aérosols que grâce à la très haute mobilité des particules.

2.7 La thermophorèse

Dans un gaz chargé en particules, la présence d'un gradient de température provoque un mouvement forcé de particules dans le sens opposé au gradient de température (Dénes Bejat, 2007).

- Si la particule est petite et que sa taille est inférieure au libre parcours moyen ($d_p < \lambda_f$), l'explication physique est dans le transfert d'énergie des molécules du gaz aux particules. Le côté "chaud" de la particule est plus exposé aux collisions des molécules que le côté "froid", la particule se déplace donc vers les régions froides (Fig. 3.10).

L'expression théorique du module de la force thermophorèse est donc :

$$F_{th} = \frac{-p\lambda_f d_p^2 \Delta T}{T} \quad (3.31)$$

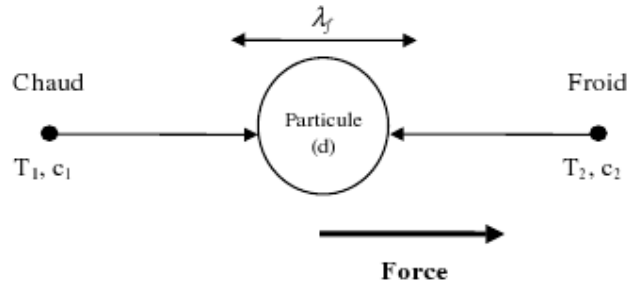


FIGURE 3.10 – Force de thermophorèse ($d_p < \lambda_f$) (Abadie, 2000).

où p est la pression du gaz, λ_f est le libre parcours moyen des molécules de gaz, ΔT est le gradient de température et T représente la température absolue de la particule.

- Dans le cas des particules plus grosses ($d_p > \lambda_f$), le phénomène s'explique différemment, car la particule est assez grosse pour avoir un gradient de température en elle-même. Dans ce cas, la température autour de la particule induit un contact plus intense avec le gaz environnant qui génère un effet supplémentaire aux déplacements précédemment décrits. L'expression théorique de la force thermophorèse est alors :

$$F_{th} = \frac{-9\pi\mu^2\lambda_f d_p H \Delta T}{2\rho T} \quad (3.32)$$

Où H prend en compte le gradient à l'intérieur de la particule :

$$H = \left(\frac{1}{1 + 6\lambda_f/d_p} \right) \cdot \left(\frac{k_a/k_p + 4.4\lambda_f/d_p}{1 + 2k_a/k_p + 8.8\lambda_f/d_p} \right) \quad (3.33)$$

Avec k_a et k_p conductivités thermique de l'air et de la particule.

La rotation aléatoire de la particule due à l'agitation thermique n'empêche pas l'établissement de la force de thermophorèse car le temps nécessaire à une rotation significative est plus grand que le temps nécessaire à la transmission de la chaleur dans la particule.

2.8 La diffusiophorèse

La diffusiophorèse existe pour des particules qui se trouvent dans un mélange gazeux où il règne un gradient de concentration. Ce gradient induit une diffusion des molécules de gaz,

vers les régions de plus basse concentration, qui exercent donc une force sur les particules. La magnitude de cette force dépend de la masse des molécules, des coefficients de diffusion des molécules composant le gaz et du gradient de concentration.

2.9 Les forces électriques

Les particules d'aérosols peuvent également être soumises à des forces électrostatiques qui proviennent soit d'une charge, ou encore d'une surface conductrice. La force de l'espace chargé résulte de répulsions mutuelles des particules de mêmes charges tout comme près des parois conductrices (Guha, 2008). Les voies aériennes pulmonaires constituent électriquement des parois conductrices. Les charges aux parois exercent une force d'attraction sur les particules d'aérosols. Sous condition normale, le dépôt des particules dans les voies aériennes humaines est principalement dû à cette force. Toutefois, lorsque la charge d'une particule est faible (moins que 10 charges élémentaires), ce type de mécanisme de dépôt peut-être négligé comparé à celui des effets inertiels et gravitationnels.

2.10 Discussion

Dans cette partie, nous avons répertorié toutes les forces qui agissent sur les particules et qui sont par conséquent les causes de leurs mouvements dans le fluide. Chacune de ces forces n'a pas la même importance suivant les conditions dans lesquelles on se trouve. Dans le domaine de la respiration humaine, on s'intéressera plus précisément aux particules dont la taille varie entre 0.1 et $100\mu m$. Certaines de ces forces peuvent alors être négligées. La thermophorèse sera quant à elle négligée puisque la température n'intervient pas dans notre étude. La diffusiophorèse peut être également négligée car les différences de pressions partielles ne sont pas assez importantes à l'intérieur des conduits aériens. Comme le champ électrique est faible, l'électrophorèse sera elle aussi négligée. Par contre, toutes les autres forces devront être prises en compte.

3 Conclusion

Les aérosols décrits dans ce chapitre comportent des particules, de taille comprise entre 0.001 à 100 μm , en suspension dans l'air. Ce sont des particules généralement caractérisées par leur diamètre aérodynamique. Ce diamètre est défini par le produit $\rho_p \cdot d_p^2$ (masse volumique de la particule ainsi que son diamètre). Lors d'un débit aérien à travers les voies aériennes humaines, les particules inhalées font principalement l'objet d'interactions fluide (air)/particule et des forces inertielles et gravitationnelles. Dans des conditions normales de pression et de température, ce sont la sédimentation et les effets inertiels qui régissent le mouvement et le dépôt des particules de taille supérieure à 1 μm , dans le cas des particules inférieures à 0.1 μm , c'est le mouvement brownien dû aux chocs entre les particules et les molécules gazeuses qui conditionne leur comportement.

Chapitre 4

Méthode numérique

Ce chapitre décrit les bases théoriques de la simulation numérique des écoulements d'air et du transport des particules pour des configurations trachéobronchiques de l'appareil respiratoire des voies aériennes représentées par des modèles de base de [Weibel \(1963\)](#). L'étude présente également en détail les équations de l'écoulement du fluide porteur et de la trajectoire de la particule ainsi que la méthode de résolution numérique. Toutes les simulations sont faites avec le code de calcul commercial *CFD-ACE* pour des nombres de Reynolds différents.

1 Modèles géométriques

Les structures des voies aériennes de poumon humain sont variables et très complexes, mais il existe des caractéristiques géométriques communes. Les voies aériennes trachéobronchiales consistent donc d'une multitude de bifurcation répétitive du modèle de [Weibel \(1963\)](#).

La configuration considérée par [Weibel \(1963\)](#) est symétrique et plane et la paroi est rigide. La géométrie de notre étude correspond au modèle de [Weibel \(1963\)](#) de la troisième à la sixième génération (Fig. [4.1](#)). Il est identique aux modèles utilisés par [Kim & Fisher \(1999\)](#) dans leurs diverses études expérimentales. La schématisation géométrique est représentée sur la Fig. [4.1](#) et les détails sont donnés dans le tableau [4.1](#).

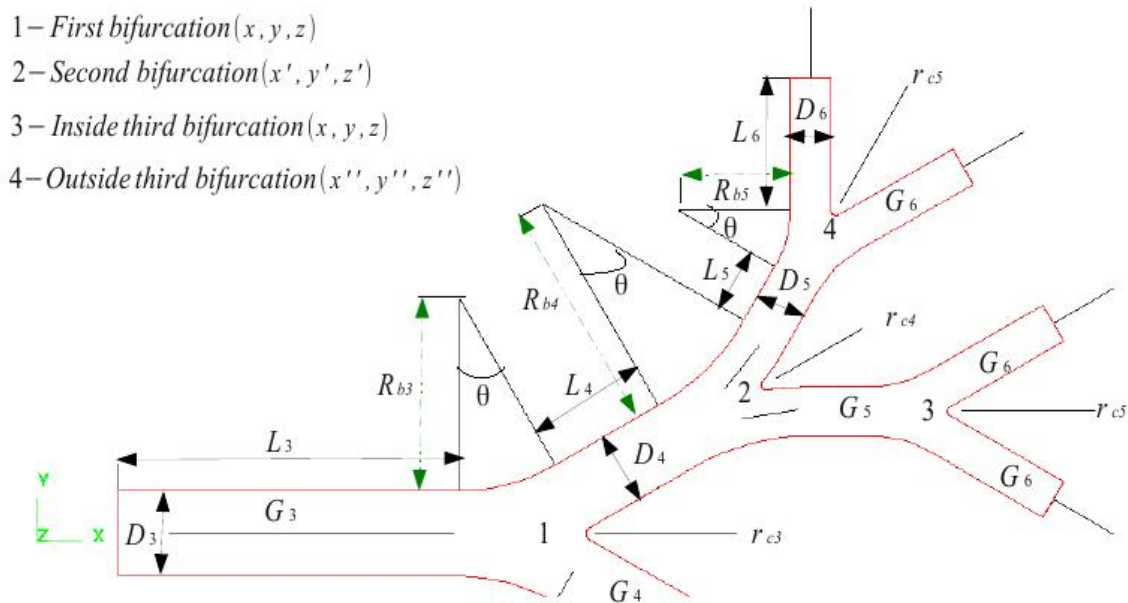


FIGURE 4.1 – Schématisation symétrique de la géométrie à triple bifurcation.

Pour comparer l'influence géométrique pour un état stationnaire ou instationnaire, trois autres modèles sont utilisés : deux modèles hors-plan sans anneaux trachéaux en considérant l'angle spatial listé dans le tableau 4.1 et un modèle plan avec anneaux trachéaux. Nous pouvons résumer nos modèles à triple bifurcation comme suit :

- (i) modèle plan (Fig. 4.2(a)),
- (ii) modèle plan avec anneaux trachéaux (Fig. 4.2(b)),
- (iii) modèle hors-plan 1 (Fig. 4.2(c)) et
- (iv) modèle hors-plan 2 (Fig. 4.2(d)).

Les dimensions des anneaux trachéaux sont obtenus d'après Zhang & Finaly (2005). Il y a 20 anneaux trachéaux lisses de sections transversales semi-circulaires avec un diamètre de $0.1D_1$ (Fig. 4.2(b)).

Pour évaluer l'effet de la présence de bifurcations en aval de la sortie de la troisième génération G_5 (voir Fig. 4.2(d)), trois autres modèles hors-plan sont utilisés :

| Génération | Segments | Diamètre D | Longueur L | Rayon de bifurcation R_b | Rayon carinal r_c | Angle $\theta(^{\circ})$ de bifurcation |
|------------|----------|-----------------|-----------------|----------------------------------|------------------------|---|
| 3 | 1 | 0.6 | 2.4 | $2.7D_4$ | $0.1D_4$ | 30 |
| 4 | 2 | 0.5 | 0.836 | $4.7D_5$ | $0.1D_5$ | 30 |
| 5 | 4 | 0.35 | 0.437 | $2.7D_6$ | $0.1D_6$ | 30 |
| 6 | 8 | 0.29 | 0.928 | $2.7D_7$ | $0.1D_7$ | 30 |
| 7 | 16 | 0.23 | 0.928 | $2.7D_8$ | $0.1D_8$ | 30 |
| 8 | 32 | 0.15 | 0.4 | $2.7D_9$ | $0.1D_9$ | 30 |
| 9 | 64 | 0.12 | 0.6 | — | — | — |

TABLE 4.1 – Paramètres géométriques de la troisième à la neuvième génération du modèle de Weibel (1963); (Comer, Kleinstreuer & Zhang, 2001; Zhang, Kleinstreuer & Kim, 2002) (cf. Fig. 4.2) (Toutes les dimensions sont en centimètres).

- (i) modèle hors-plan 2 à cinq générations (Fig. 4.2(e));
- (ii) modèle hors-plan 2 à six générations (Fig. 4.2(f)) et
- (iii) modèle hors-plan 2 à sept générations (Fig. 4.2(g)).

2 Équations de l'étude

2.1 Équations gouvernant l'écoulement

Pour un écoulement incompressible, laminaire, tri-dimensionnel et stable, les équations (équations de Navier-Stokes) de transport de fluide soumis aux seules forces de surface et leurs conditions aux limites peuvent être écrites :

Continuité :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (4.1)$$

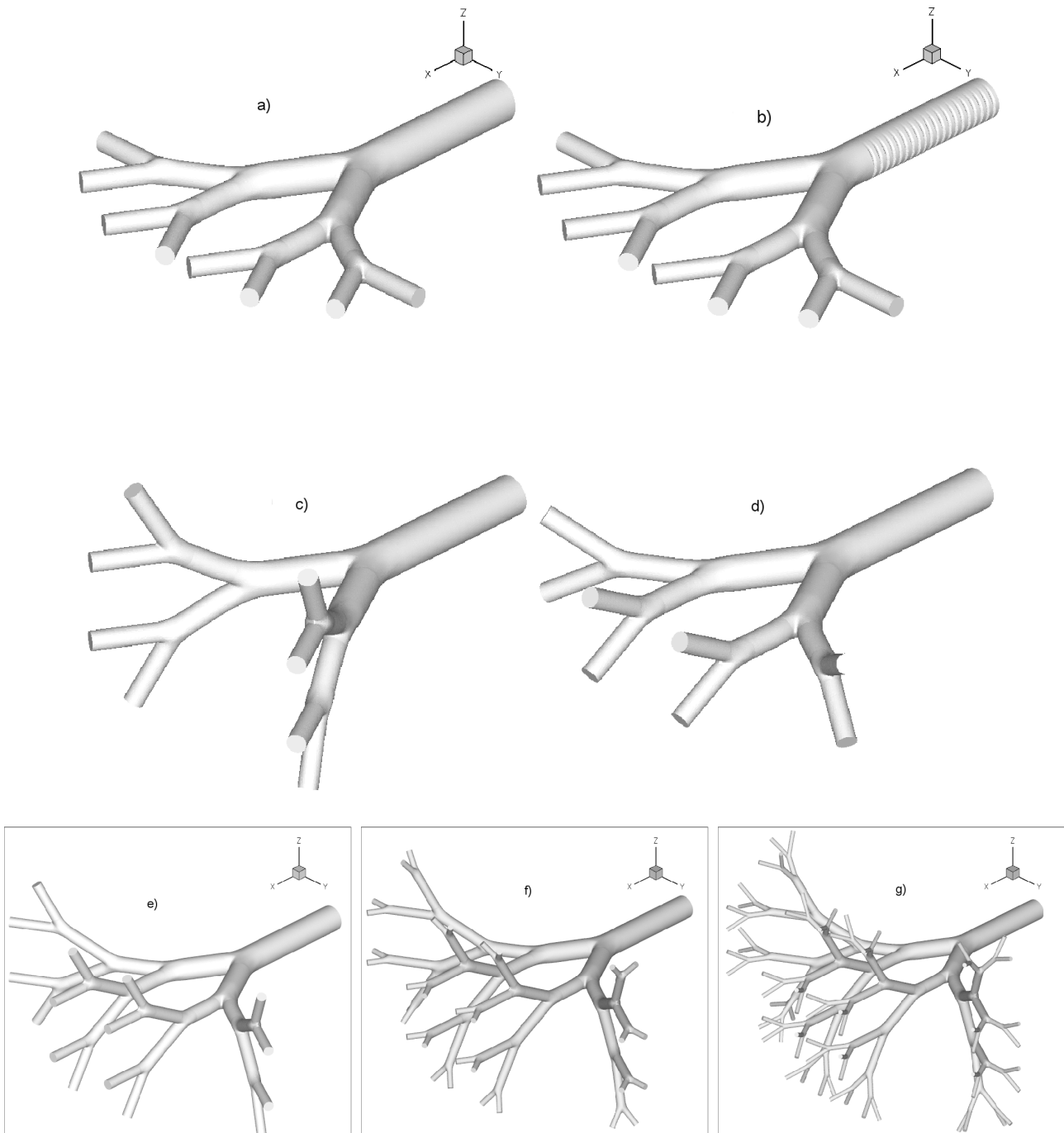


FIGURE 4.2 – Modèles de l'arbre bronchique : (a) modèle plan sans anneaux trachéaux, (b) modèle plan avec anneaux trachéaux, (c) modèle hors-plan 1, (d) modèle hors-plan 2, (e) modèle hors-plan 2 à cinq générations, (f) modèle hors-plan 2 à six générations et (g) modèle hors-plan 2 à sept générations.

Quantité de mouvement :

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \cdot \mathbf{u} = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} \quad (4.2)$$

Dans ces équations, $\mathbf{x} = (x, y, z)$ est le vecteur position cartésien, $\mathbf{u} = (u, v, w)$ est le champ de vitesse et p est la pression statique. Toutes ces variables sont sans dimension et elles sont définies par rapport aux variables dimensionnelles (désigné ici par l'exposant *) par $\mathbf{x} = \frac{x^*}{D_{inlet}}$, $\mathbf{u} = \frac{u^*}{U}$ et $p = \frac{p^*}{\rho U^2}$, où U_{moy} est la vitesse moyenne à la section d'entrée et D_{inlet} est le diamètre du cylindre-parent. Le nombre de Reynolds est défini comme $Re_{D_{inlet}} = \frac{\rho U D_{inlet}}{\mu}$, où la densité de l'air $\rho = 1.1614 kg/m^3$ et sa viscosité dynamique du fluide $\mu = 1.846 \times 10^{-5} kg/(m.s)$ ont été supposées constantes (Comer, Kleinstreuer & Zhang, 2001; Liu et al., 2002).

Les conditions aux limites peuvent être résumées comme suit :

(i) à l'entrée de la conduite $G3$, les composantes de la vitesse axiale sont données par :

$$u = \begin{cases} 1(m/s) & \text{pour un profil de vitesse d'entrée uniforme} \\ \frac{U_{max}}{R^2}(R^2 - y^2 - z^2) & \text{pour un profil de vitesse d'entrée parabolique} \end{cases} \quad (4.3)$$

où R est le rayon du cylindre-parent.

$$v = 0, w = 0 \quad (4.4)$$

(ii) aux sections des sorties :

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial n} = 0, p = cte(0) \quad (4.5)$$

où n désigne la direction normale aux limites des sections des sorties et p la pression.

(iii) à la surface de la paroi :

$$\mathbf{u} = 0 \quad (4.6)$$

Ces équations mathématiques utilisées pour les écoulements dans une conduite, seront résolues numériquement à l'aide du code commercial *CFD-ACE*.

2.2 Équations gouvernant le transport et le dépôt des particules

Dans ce travail, les simulations sont réalisées pour des particules de diamètre $d_p = 5\mu m$. Compte tenu du faible nombre de Reynolds des particules $Re_p = \frac{\rho d_p |\vec{\mathbf{u}} - \vec{v}_p|}{\mu} \ll 1$ et du grand rapport de densités, $\rho_p \gg \rho$, la force de traînée est dominante, fondée sur l'ordre de l'argument de magnitude (Clift et al., 1978; Crowe et al., 1998; Li et al., 2007a). Ces particules sont de tailles relativement importantes, le mouvement brownien peut être négligé. La particule est considérée comme beaucoup plus dense que le fluide, ce qui fait que les termes qui dépendent du rapport de densité comme la force de pression, la force de flottabilité, les effets de masse ajoutée et la force de Basset sont très faibles. Les forces de portance dans l'écoulement de Stokes sont négligeables en raison de la faible rotation de particules et du faible cisaillement de l'écoulement laminaire.

Le mouvement de telles particules solides dans un fluide est alors gouverné par l'équation de la trajectoire des particules suivante (Clift et al., 1978; Li et al., 2007a) :

$$m_p \frac{d^2 \vec{x}_p}{dt^2} = C_{DP} \frac{\pi d_p^2}{4} \rho \frac{(\vec{\mathbf{u}} - \vec{v}_p) |\vec{\mathbf{u}} - \vec{v}_p|}{2}, \quad (4.7)$$

où m_p est la masse d'une seule particule sphérique, \vec{x}_p est le déplacement, $\vec{\mathbf{u}}$ est la vitesse du fluide, \vec{v}_p est la vitesse de la particule, et C_{DP} est le coefficient de traînée (Clift et al., 1978).

L'équation finale peut être formulée comme suit :

$$St \frac{d\vec{v}_p}{dt} = (\vec{\mathbf{u}} - \vec{v}_p) \phi_D \frac{U}{D_{inlet}}, \quad (4.8)$$

où U est la vitesse moyenne d'entrée, D_{inlet} est le diamètre du cylindre-parent et St est le nombre de Stokes défini comme :

$$St = \frac{\rho_p d_p^2 U}{18\mu D_{inlet}} = \frac{\rho_p d_p^2}{18\rho D_{inlet}^2} Re, \quad (4.9)$$

où ρ_p est la densité de la particule et μ la viscosité dynamique du fluide. ϕ_D est une correction à la force de traînée de Stokes pour des nombres de Reynolds finis des particules basées sur la

vitesse de glissement ($\vec{\mathbf{u}} - \vec{v}_p$) :

$$\phi_D = C_{DP} \frac{Re_p}{24}, \quad (4.10)$$

où

$$C_{DP} = \frac{C_D}{C_{slip}}, \quad (4.11)$$

où

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} & \text{for } 0 < Re_p \leq 1 \\ \frac{24}{Re_p^{0.646}} & \text{for } 1 < Re_p \leq 400 \end{cases} \quad (4.12)$$

Clift et al. (1978), Zhang, Kleinstreuer & Kim (2002) et Comer, Kleinstreuer & Kim (2001) ont également donné l'expression empirique pour le facteur de glissement, C_{slip} :

$$C_{slip} = 1 + \frac{2\lambda}{d_p} [1.142 + 0.058 \exp(-0.999 \frac{d_p}{2\lambda})] \quad (4.13)$$

où λ est le libre parcours moyen du fluide. La gamme représentative de nombres de Stokes (Li et al., 2007c) et les valeurs des paramètres associés sont données dans la table 4.2 pour un écoulement stationnaire et dans la table 4.3 pour un écoulement instationnaire.

Le dépôt régional de microparticules dans les voies respiratoires de l'homme peut être quantifié en termes de la fraction de dépôt (DF) ou efficacité de dépôt (DE) dans une région donnée. Elles sont définies comme :

$$DF(\%) = \frac{\text{nombre de particules déposées dans une région donnée}}{\text{nombre total de particules entrant dans la bouche}} \quad (4.14)$$

et

$$DE(\%) = \frac{\text{nombre de particules déposées dans une région donnée}}{\text{nombre total de particules entrant dans cette région}} \quad (4.15)$$

L'efficacité de dépôt (DE) régional est principalement utilisée pour caractériser le dépôt dans le poumon. Les DEs et DFs sont les mêmes pour le modèle des voies respiratoires orales. Dans cette étude, seule les DEs sont calculées.

| <i>Poumon</i> | Modèles | | | Rat | Lapin |
|--|---------------|----------|-----------|----------|----------|
| <i>Paramètres</i> | | | | | |
| Nombre de Reynolds, $Re_{D_{inlet}}$ | 500 | 1 000 | 1 500 | 152 | 176 |
| Vitesse moyenne, $V_{moy} = U(m/s)$ | 1.32 | 2.649 | 3.97 | 1 | 1 |
| Nombre de Stokes, $St = \frac{\rho_p d_p^2 Re_{D_{inlet}}}{\rho D^2 18}$ | | | 0.02-0.12 | | |
| Diamètre de la particule, $d_p(\mu m)$ | | | 5 | | |
| Densité de la particule, $\rho_p(kg.m^{-3})$ | 1204- 7224 | 602-3612 | 401-2408 | 644-3865 | 744-4465 |

TABLE 4.2 – Paramètres numériques de l'écoulement stationnaire (à noter que la section transversale des poumons du lapin et du rat n'est pas un cercle et D_{inlet} est un diamètre "approximatif").

| État physique | Repos | Activité légère |
|--|-----------|-----------------|
| Volume courant (ml) | 500 | 907 |
| Fréquence respiratoire (cycle/min) | 14 | 15.5 |
| Nombre de Womersley, $W_o = \frac{D_{inlet}}{2} \sqrt{\frac{\omega}{\nu}}$ | 0.89 | 0.93 |
| Nombre de Strouhal, $Str = \frac{W_o^2}{Re_{D_{inlet}}}$ | 0.002 | 0.0011 |
| Nombre de Reynolds, $Re_{D_{inlet}}$ | 433 | 1091 |
| Vitesse moyenne, $V_{moy} = U(m/s)$ | 1.449 | 2.89 |
| Nombre de Stokes, $St = \frac{\rho_p d_p^2 Re_{D_{inlet}}}{\rho D^2 18}$ | 0.02-0.12 | 0.02-0.12 |
| Diamètre de la particule, $d_p(\mu m)$ | 5 | 5 |
| Densité de la particule, $\rho_p(kg.m^{-3})$ | 1100-6602 | 551.8-3311.3 |

TABLE 4.3 – Paramètres numériques de l'écoulement instationnaire.

3 Écoulement laminaire dans une conduite

L'écoulement d'air dans une conduite cylindrique donnée exerce une certaine résistance visqueuse qui crée une chute de pression appelée "perte de charge" le long de la conduite. En imposant à l'écoulement des conditions aux limites constantes, Reynolds a montré en 1883 qu'il existe deux sortes d'écoulements suivant la valeur d'un nombre sans dimension appelé nombre de Reynolds et noté Re :

$$Re = \frac{UL}{\nu} \quad (4.16)$$

où U est la vitesse caractéristique de l'écoulement, L le diamètre de la conduite et ν la viscosité cinématique du fluide d'air. Pour une configuration géométrique donnée, deux types d'écoulements fondamentalement différents correspondant à des pertes de charge différentes peuvent être envisagés :

- (i) un écoulement permanent n'est généralement stable (une perturbation introduite dans l'écoulement s'atténue) que si les vitesses ne sont pas trop grandes. Cette stabilité est liée à la valeur du nombre de Reynolds. L'écoulement sera stable pour de faibles valeurs de nombre de Reynolds, les lignes de courant seront stationnaires et l'écoulement est dit laminaire ;
- (ii) si au contraire le nombre de Reynolds est grand, une perturbation introduite dans l'écoulement s'amplifie. Même en imposant des conditions aux limites constantes, le mouvement n'est plus permanent, les lignes de courant deviennent instationnaires, les trajectoires s'enchevêtrent inextricablement et il devient impossible de décrire avec exactitude l'écoulement qui est alors qualifié de turbulent.

Nous allons exprimer le champ de vitesse d'un fluide visqueux incompressible en écoulement laminaire dans une conduite cylindrique horizontale de rayon R et de longueur L dans lequel nous allons étudier l'écoulement induit par une différence de pression $\Delta P = P_1 - P_2$ entre l'entrée et la sortie de la conduite. Nous nous intéresserons aux écoulements unidirectionnels parallèles à l'axe Oz du cylindre pour lesquels la vitesse V_z dépend uniquement de la distance r à l'axe du cylindre (Fig. 4.3).

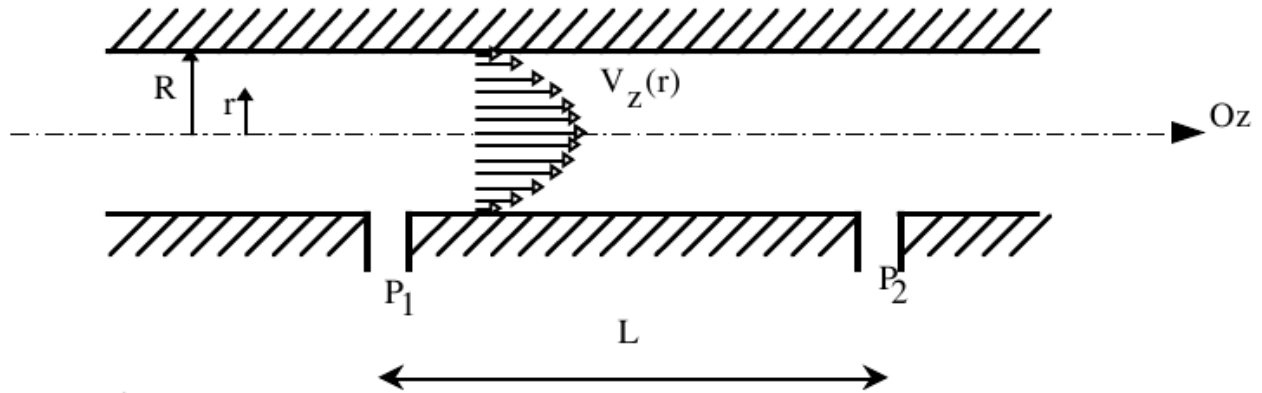


FIGURE 4.3 – Écoulement de Poiseuille dans une conduite cylindrique (Dennis, 2003).

La vitesse du fluide est donnée par la loi de Haagen-Poiseuille :

$$V_z = \frac{1}{4\mu} \frac{\Delta p}{L} (R^2 - r^2) = V_{max} \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right) \quad (4.17)$$

avec

$$V_{max} = \frac{R^2}{4\mu} \left(\frac{\Delta p}{L}\right) \quad (4.18)$$

où V_{max} est la valeur maximum de la vitesse obtenue sur l'axe du cylindre ($r = 0$). Le débit volumique du fluide q_v dans la section du cylindre s'écrit :

$$q_v = \int_0^R V_z(r) 2\pi r dr = \frac{\pi R^4}{8\mu} \left(\frac{\Delta p}{L}\right) \quad (4.19)$$

avec R et L , rayon et longueur du cylindre et Δp la différence de pression entre les deux extrémités. On en déduit la vitesse moyenne V_{moy} :

$$V_{moy} = \frac{q_v}{S} = \frac{q_v}{\pi R^2} = \frac{R^2}{8\mu} \left(\frac{\Delta p}{L}\right) \quad (4.20)$$

soit

$$V_{moy} = \frac{V_{max}}{2} \quad (4.21)$$

Le profil parabolique ne s'établit pas dès l'entrée du tube mais au-delà d'une distance appelée longueur d'entrée. Cette longueur d'entrée provient de la compétition entre la diffusion des gradients de vitesse induit par la viscosité du fluide et l'advection par l'écoulement.

4 Modélisation numérique utilisée

Dans cette étude, les équations sont résolues par le package commercial *CFD* du logiciel *ACE* sur un maillage non structuré avec un schéma centré.

Après chaque pas de temps, pour chaque particule, l'information sur la position, le temps et les trois composantes de la vitesse ainsi que la vitesse avec laquelle les particules franchissent les limites du volume de contrôle a été obtenu. L'effet de symétrie de l'écoulement sur le mouvement des particules a également été testé c'est à dire qu'aucune particules n'a traversé le plan de symétrie dans la série de tests. Le nombre de particules libérées et l'intervalle de temps de la simulation ont été choisi en augmentant la concentration de particules d'entrée et en diminuant l'intervalle de temps jusqu'à ce que l'efficacité de dépôt des particules (*DE*) devienne indépendante du nombre de particules injectées et du pas de temps simulé. Un total d'environ 19 000 particules ont été libérées au cours d'un cycle respiratoire, au début de l'inspiration.

Le maillage (Fig. 4.5) a été généré à partir des données définissant la surface provenant des modèles expérimentaux (Comer, Kleinstreuer & Zhang, 2001). En utilisant la condition de symétrie, la simulation de champ d'écoulement ne concerne que la moitié supérieure du modèle de bifurcation (c-à-d, $z \geq 0$).

Un raffinement successif du maillage a été effectué jusqu'à obtenir l'indépendance de la solution du champ d'écoulement et de l'efficacité de dépôt des particules. Des grilles constituées d'environ 180 000, 393 660, 700 000 et 1 232 438 cellules ont été testées. Peu de variation dans les paramètres d'intérêt, à savoir, l'efficacité de dépôt des particules et le champ de vitesse, a été observé entre les deux plus fortes densités du maillage. La taille du maillage final des configurations plane et non-plane est de 393 660 et 394 537 cellules tétraédriques, respectivement (car le maillage 1 232 438 est trop coûteux) (table 4.4).

CFD-ACE est un ensemble d'outils numériques pour l'analyse et le calcul multi-physique.

CFD-ACE a été conçu dans un esprit de modularité et d'extensibilité, de manière à offrir une très grande souplesse d'utilisation. Adopté par plus de 400 sociétés et instituts dans le monde, *CFD* intègre des modèles physiques et numériques à la pointe de la technologie, ainsi

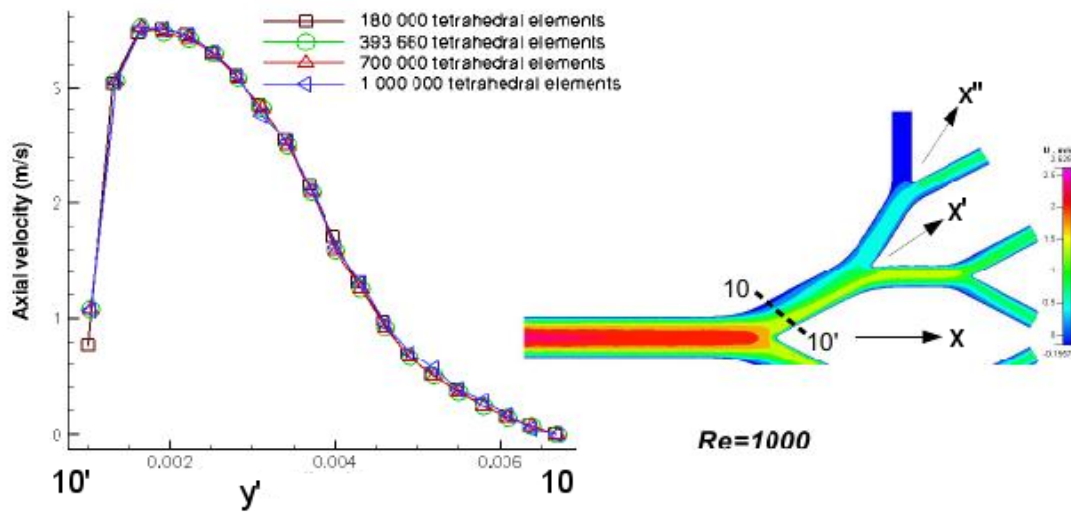


FIGURE 4.4 – Comparaison des différents maillages non-structuré à cellules tétraédrique pour $Re_{Dinlet}=1\ 000$.

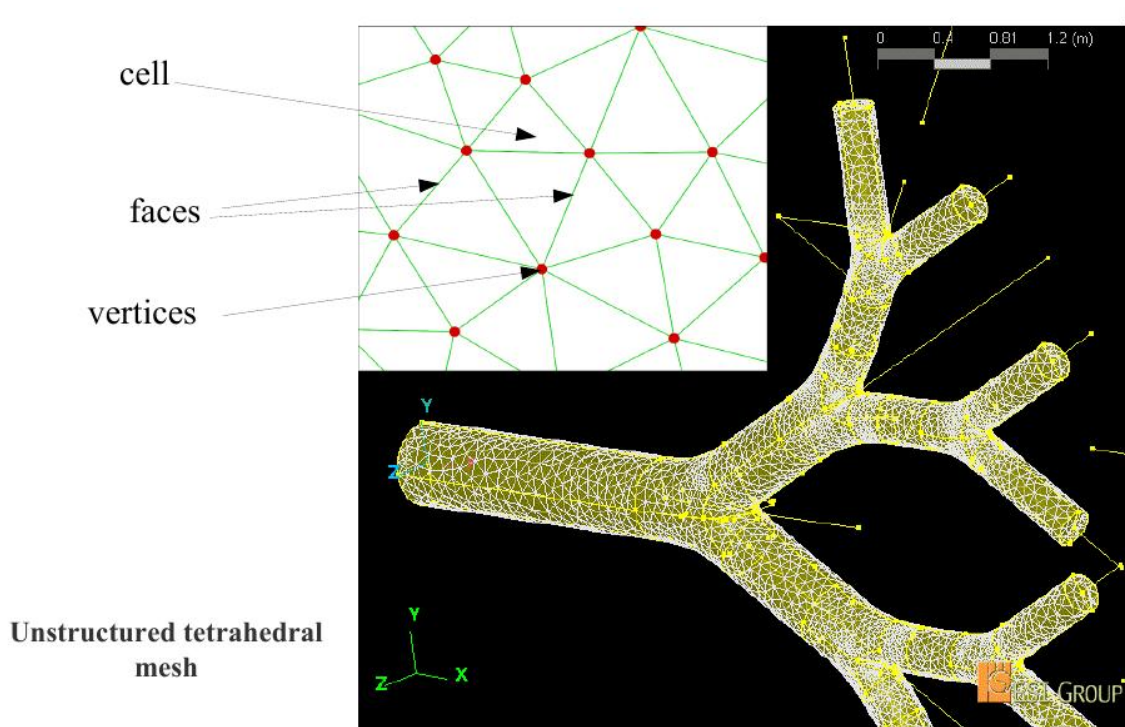


FIGURE 4.5 – Maillage non-structuré à 393 660 cellules tétraédriques.

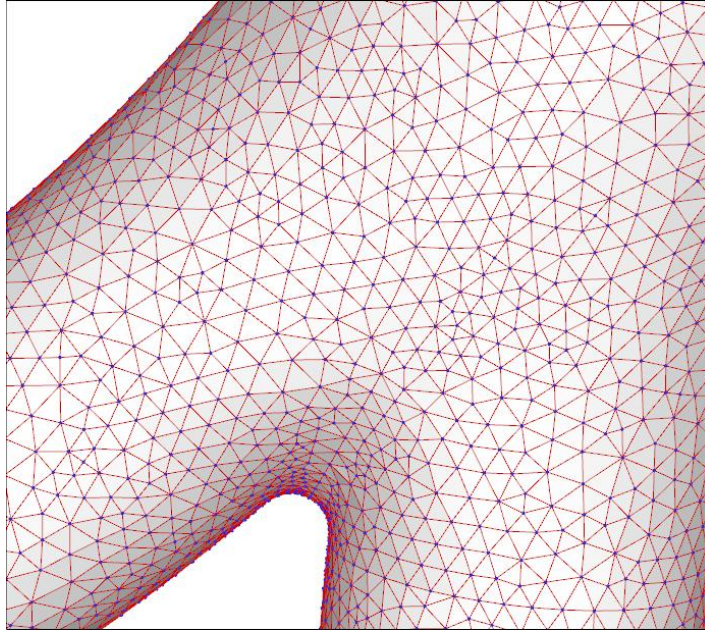


FIGURE 4.6 – Gros plan sur le maillage au niveau de la seconde bifurcation interne de la géométrie de la Fig. 4.5.

| <i>Données sur la grille 3D des modèles de Weibel</i> | plan sans anneaux trachéaux | plan avec anneaux trachéaux | hors-plan 1 | hors-plan 2 |
|---|-----------------------------------|-----------------------------------|-------------|-------------|
| Nombre total de noeuds | 81 774 | 98 786 | 82 005 | 81 847 |
| Nombre total de faces triangulaires | 821 955 | 1 004 313 | 823 860 | 822 480 |
| Nombre total de cellules tétraédriques | 393 660 | 481 987 | 394 537 | 393 902 |

TABLE 4.4 – Résumé des données sur la grille 3D de maillages des configurations $G3$ - $G6$.

qu'un environnement d'aide à la conception basée sur la simulation. Le logiciel propose également toutes les techniques de maillages, notamment la modélisation structurée multibloc, la modélisation non structurée polyédrique générale, la technique des interfaces arbitraires, ainsi que le déplacement et la déformation des mailles.

Le mailleur *CFD-GEOM* est capable de générer des maillages de très haute qualité ; or meilleur est le maillage, meilleures seront les performances du solveur en termes de qualité, de

précision et de vitesse de convergence de la solution.

Il existe plusieurs méthodes pour modéliser les écoulements diphasiques constitués d'une phase continue (l'air) et d'une phase dispersée (aérosols) :

- (i) les méthodes Euler-Lagrange, où chaque particule est suivie individuellement (équation de la trajectoire pour chaque particule) ;
- (ii) les méthodes Euler-Euler, où la phase dispersée est traitée numériquement comme un second fluide. On écrit ainsi des équations de bilan en formulation eulérienne pour chaque phase.

Pour modéliser le transport d'aérosols dans un local, les deux méthodes sont rencontrées dans la littérature. De plus, bien que les contextes de ces travaux soient similaires, on rencontre d'un auteur à l'autre une grande diversité dans le choix de modélisation. Dans ce qui suit c'est la méthode euler-lagrangienne qui sera retenue.

En terme de précision du temps (différenciation temporelle), le logiciel nous fournit deux choix possibles qui sont les suivant :

- (i) Euler (1er ordre) : la valeur par défaut est schéma d'Euler explicite.
- (ii) la méthode semi-implicite : nous permet d'entrer un "facteur de mélange". Un facteur de mélange de 0.5 pure conduit à la méthode de Crank-Nicolson et un facteur de mélange (β) de 1.0 à celle d'Euler implicite. La valeur par défaut est de 0.6 (valeur mise par défaut dans *ACE* pour effectuer nos calculs).

Dans toutes nos simulations numériques, la méthode semi-implicite a été utilisée.

5 Conclusion du chapitre

La méthode de simulation numérique des fluides a émergé comme un outil utile pour la prédiction de l'écoulement d'air et le transport de particules dans les voies aériennes du poumon

humain (Keith Walters & William, 2011). Les simulations lagrangiennes de suivi des particules sont réalisées en combinaison avec des simulations eulériennes de l'air dans une représentation idéalisée de l'arbre bronchique des voies aériennes. De nombreux modèles sont testés dans ce travail (voir chapitre "Application I : Modèles bronchiques"). Quatre modèles symétriques (**deux configurations hors-planes sans anneaux trachéaux et deux planes avec et sans anneaux trachéaux**) de quatre générations en $3D$ basés sur le modèle de 23-génération de Weibel (1963) sont générés. Les équations de Navier-Stokes laminaires, incompressibles en $3D$ sont résolues numériquement sur un maillage tétraédrique non-structuré. Les résultats numériques obtenus seront comparés aux données expérimentales existantes.

Chapitre 5

Application I : Modèles bronchiques génériques

Dans ce chapitre, le transport et le dépôt des particules sphériques de diamètre $5\mu m$ dans des configurations symétriques à triple bifurcation sont simulés et discutés. Quatre modèles de quatre générations $G3-G6$ en $3D$ basés sur le modèle de 23-générations de [Weibel \(1963\)](#) sont générés. Les équations de Navier-Stokes laminares, incompressibles et tridimensionnelles sont résolues sur un maillage tétraédrique non-structuré. Dans la première partie, nous étudierons le transport des particules dans un écoulement stationnaire et dans la seconde partie les simulations seront effectuées pour un écoulement instationnaire.

1 Simulation dans un écoulement stationnaire

Les simulations numériques du transport et du dépôt de particules sont effectuées dans quatre générations ($G3-G6$) de modèles plan et hors-plan tri-dimensionnels des conduits bronchiques pour des écoulements laminares et stationnaires. Les modèles permettent de calculer la quantité des particules déposées en un endroit donné en fonction de leur densité et des paramètres géométriques. Dans cette partie, trois valeurs de nombre de Reynolds ($Re_{D_{inlet}} = 500$, $Re_{D_{inlet}}=1\ 000$ et $Re_{D_{inlet}}=1\ 500$) sont considérées.

1.1 Validation du code CFD-ACE¹

La Fig. 5.1(a) représente la convergence des trois composantes de la vitesse ainsi que la pression. Comme la simulation est stationnaire, les variables (les vitesses et la pression) sont représentées en fonction des itérations (pour cette simulation à $Re_{D_{inlet}} = 500$, l'écoulement a atteint sa convergence à la 465ème itération (Fig. 5.1(a)).

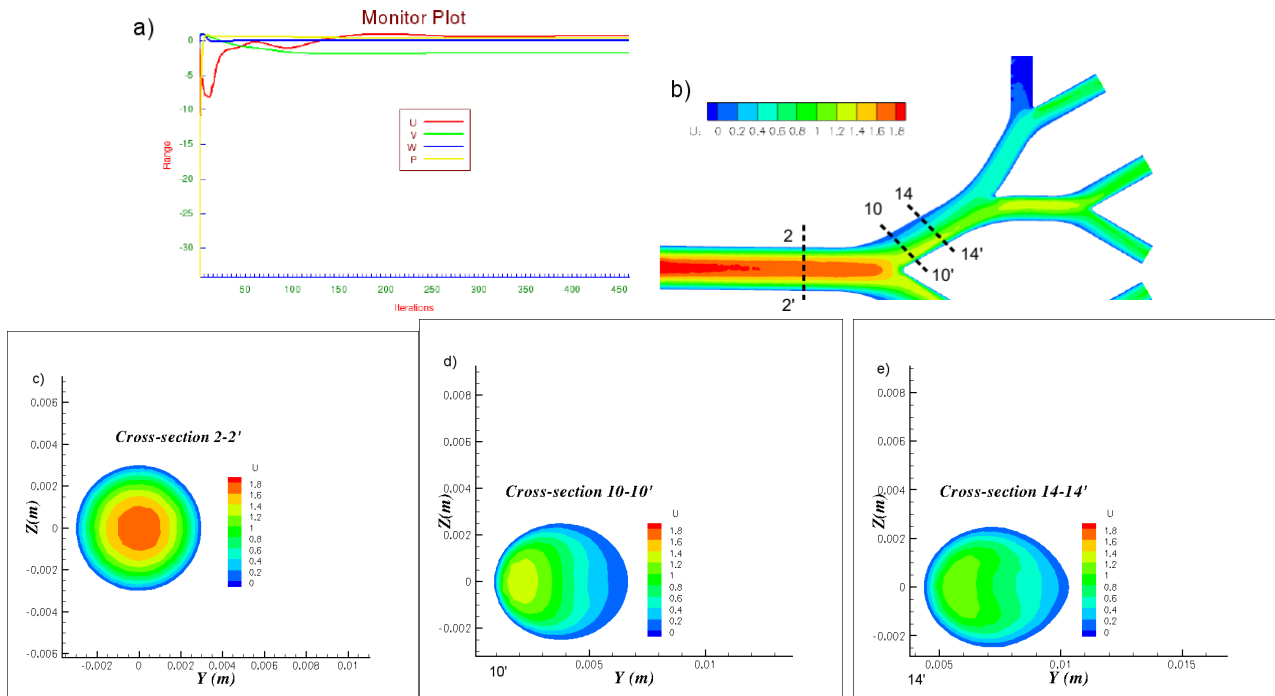


FIGURE 5.1 – Écoulement laminaire et stationnaire, $Re_{D_{inlet}} = 500$: (a) convergence de la solution initiale, (b) vue en 2-D de l'écoulement et (c), (d), (e) vitesse axiale.

Le code de simulation numérique (*CFD-ACE*) a été validé par des comparaisons avec des ensembles des données expérimentales fournis par Zhao & Lieber (1994) (les emplacements sur une seule bifurcation sur un modèle plan : voir Fig. 5.1(b) et les résultats obtenus à savoir les vitesses axiales (Figs. 5.1(c), (d), (e) et les profils de vitesse : voir Fig. 5.2). Les travaux menés pour ce cas particulier d'étude ont été présentés par Comer, Kleinstreuer & Zhang (2001); Li et al. (2007b).

1. Ilmi Robleh, H., Hoarau, Y., Dušek, J., Transport de particules dans un modèle de Weibel. Présentation orale. CFM '09. XIXème Congrès Français de Mécanique, Marseille, 24-28 Août 2009.

Pour un écoulement stationnaire, un profil de vitesse parabolique est observé dans les études numériques et expérimentales à l'emplacement 2 (Fig. 5.2(a)) ce qui est consistant avec un écoulement axi-symétrique. A l'emplacement 10 (Fig. 5.2(b)), le maximum de vitesse se déplace vers la paroi intérieure lorsque l'écoulement passe du cylindre-parent au cylindre-fille, la symétrie axiale est perdue au profit d'une symétrie par rapport au plan médian. Cet effet est encore plus prononcé à l'emplacement 14 (Fig. 5.2(c)), on note le bon accord entre la simulation et l'expérience. Ici l'écoulement est gouverné essentiellement par la convection et les forces d'inertie font que l'écoulement se concentre sur les bifurcations intérieures. Pour chacun de ces endroits respectifs, les observations peuvent être complétées par des représentations des vitesses en coupe transversale (Figs. 5.1(c), (d), (e)).

La Fig. 5.3 montre la comparaison de l'efficacité de dépôt obtenue par notre simulation dans un modèle plan à double bifurcation pour un écoulement stationnaire avec les données de Kim & Fisher (1999). En raison de la difficulté de contrôler strictement le débit et le diamètre des particules, le nombre de Reynolds peut varier de façon significative au cours des expériences. En outre, des différences entre les prédictions numériques et les mesures expérimentales peuvent être causées par des décalages subtils dans les modèles de géométrie et les mesures de dépôt. Ainsi, en négligeant l'effet du nombre de Reynolds expérimental et en se concentrant sur l'efficacité de dépôt des particules, les résultats de la simulation sont en très bon accord avec les données expérimentales de Kim & Fisher (1999).

Le bon accord entre les résultats numériques et expérimentaux montre que le code *CFD-ACE* est suffisamment précis pour simuler un écoulement réel et le dépôt des particules dans les voies aériennes humaines.

1.2 Distribution de vitesse

Les vitesses moyennes d'admission à différents nombres de Reynolds $Re_{D_{inlet}}$ (voir table 4.2) sont utilisées afin de bien illustrer l'effet de $Re_{D_{inlet}}$ sur la distribution des vitesses. Seul les résultats les plus pertinents sont présentés dans ce qui suit :

Profils de vitesse axiale

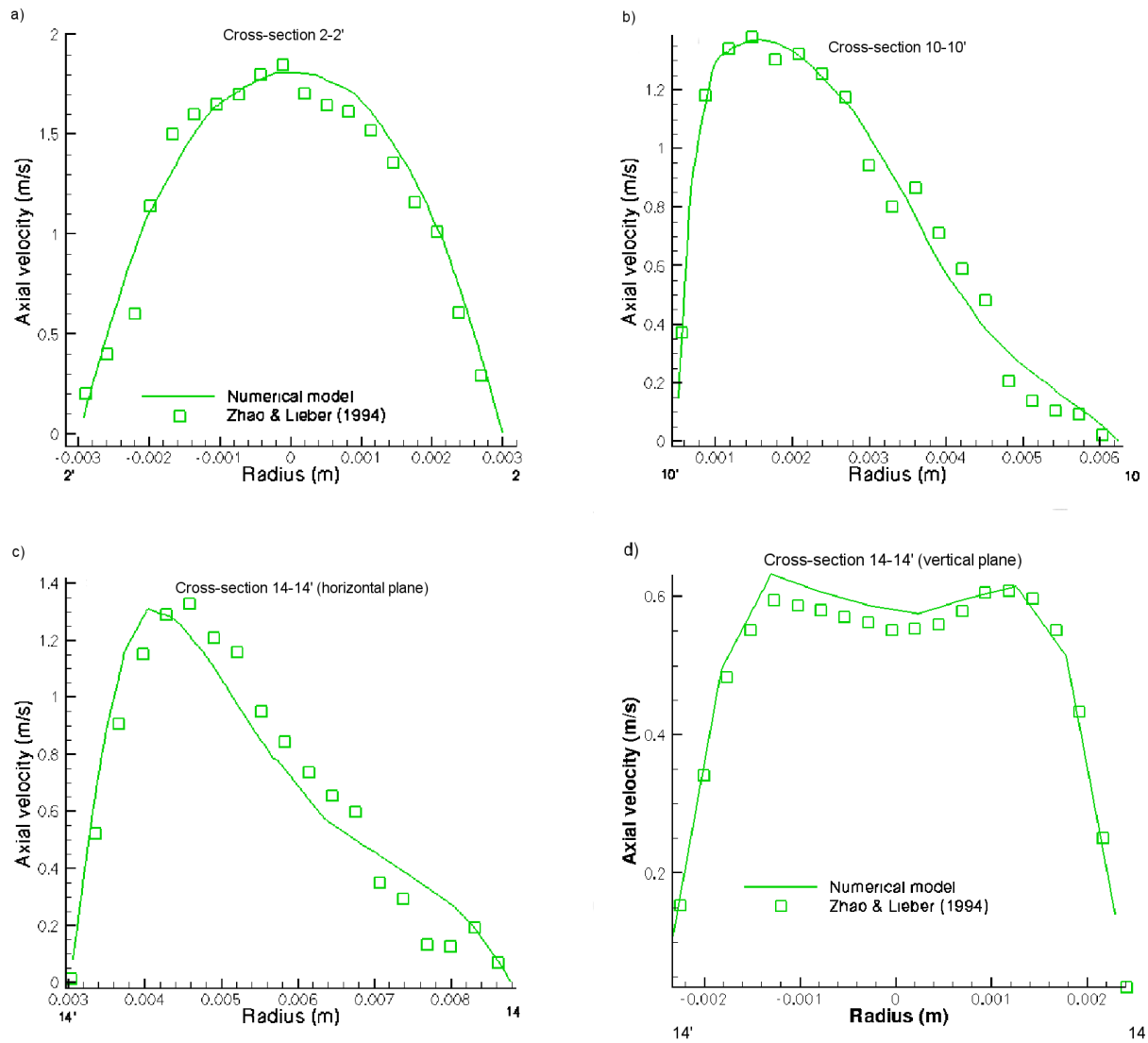


FIGURE 5.2 – Comparaison entre les résultats numériques et les mesures expérimentales de [Zhao & Lieber \(1994\)](#) des profils de vitesse axiale d'un modèle plan à une seule bifurcation dans une voie aérienne à triple bifurcation avec $Re_{D_{inlet}} = 500$, aux emplacements 2, 10 et 14 de la Fig. 5.1(b).

Les profils de vitesse axiale dans différentes sections du modèle plan de la voie aérienne sont tracés dans la Fig. 5.4. Le profil de vitesse à l'entrée de la conduite est parabolique, en raison des conditions aux limites imposées initialement à l'écoulement. A l'approche de la première bifurcation symétrique (Fig. 5.4(a)), le profil de vitesse s'aplatit et le débit de l'écoulement se

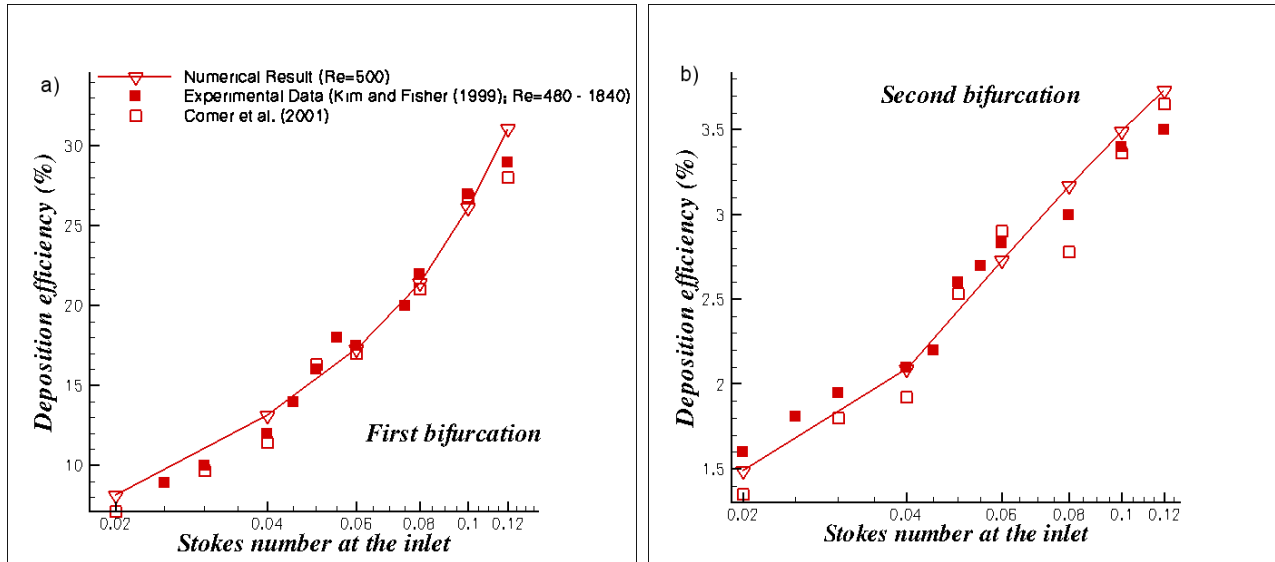


FIGURE 5.3 – Comparaison des efficacités de dépôt des particules (DE) numériques et expérimentales dans le modèle plan à double bifurcation sous flux constant (données expérimentales obtenues à partir de [Kim & Fisher \(1999\)](#)) : (a) DE à la première bifurcation et (b) DE à la seconde bifurcation.

divise dans les deux cylindres-filles. La bifurcation induit un écoulement secondaire caractérisé par deux tourbillons contra-rotatifs de types tourbillons de Dean (Fig. 5.4(a)).

Au delà de la première bifurcation à la sortie de $G3$; l'effet du flux secondaire causé par la courbure de la trajectoire de l'écoulement et la division du flux affecte grandement les profils de vitesse qui sont caractérisés par une forte asymétrie dans le plan de bifurcation (Figs. 5.4(b) et(c)). L'écoulement se concentre vers les parois intérieures.

Il s'en suit qu'au niveau de la génération $G5$, l'écoulement secondaire est beaucoup plus fort dans la branche interne que dans la branche latérale. Le maximum de vitesse se recentre dans la conduite (Fig. 5.4(d)).

L'étude montre un profil de vitesse asymétrique dans le plan horizontal de bifurcation (Figs. 5.4(b), (c) et (d)) et un profil de vitesse en forme de M dans le plan vertical de l'écoulement (Fig. 5.4(e)).

Avec $Re_{D_{inlet}}$ croissant, le profil de vitesse prend une forme de plus en plus asymétrique. Ces

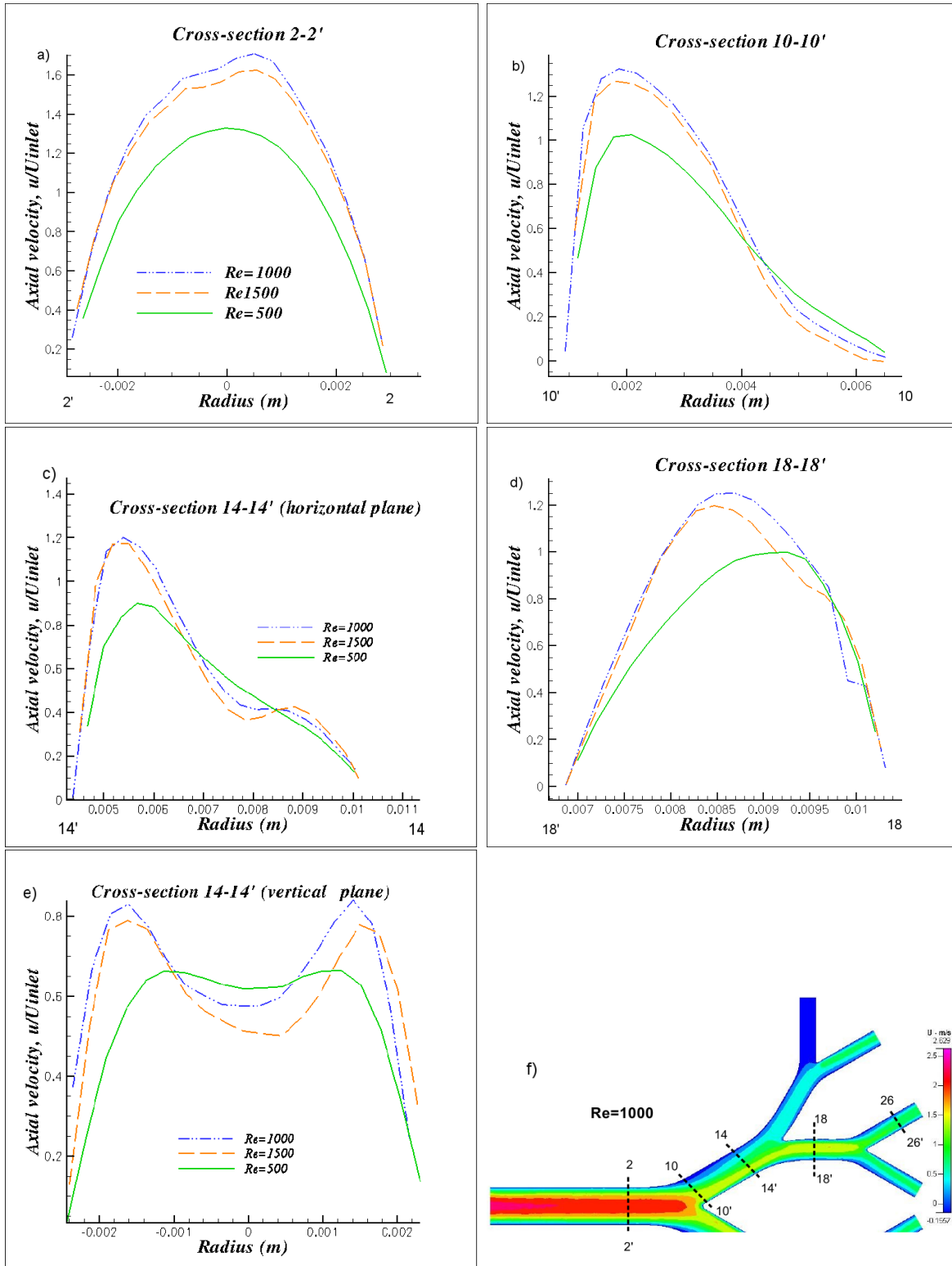


FIGURE 5.4 – Profils de vitesse axiale.

résultats montrent clairement l'effet de $Re_{D_{inlet}}$ et la courbure ou l'angle de branchement sur la distribution des vitesses. Plus le nombre de Reynolds $Re_{D_{inlet}}$ est élevé et plus l'asymétrie du profil de vitesse augmente.

Vecteurs vitesse axiale

Les vecteurs vitesses axiales observés sur une configuration plane, sans anneaux trachéaux, sont représentés dans la Fig. 5.5, pour $Re_{D_{inlet}}=1\,000$. Le long de la conduite de la génération $G4$, le flux secondaire conduit le fluide vers la paroi interne de la bifurcation et les profils de vitesse deviennent asymétriques avec la vitesse maximale se trouvant près de la paroi interne (Fig. 5.5(b)). Quand l'écoulement se rapproche de la seconde bifurcation, c'est-à-dire, à la sortie de la génération $G4$ des voies respiratoires, l'asymétrie dans le profil de vitesse commence à changer (Fig. 5.5(c)) et à s'incliner vers l'extérieur de la paroi, c'est ce qui se passe au niveau de la troisième bifurcation externe (Fig. 5.5(e)), mais le profil de vitesse dans la troisième bifurcation interne (Fig. 5.5(f)) demeure semblable à la situation observée lors de la première bifurcation. Une différence des profils de vitesse axiale très nette apparaît au niveau de la seconde bifurcation des modèle plan (Fig. 5.5(c)) et hors-plan 1 (Fig. 5.5(d)), cela est dû à la géométrie des configurations. Dans la Fig. 5.5(d), l'écoulement change de direction et à la sortie de $G4$, le profil de vitesse axiale est symétrique, maximal proche à la paroi externe. La Fig. 5.7 du flux secondaire illustre un peu plus en détail cette différence des profils de vitesse observés entre les deux modèles (plan et hors-plan 1) à la sortie de $G4$.

Vecteurs flux secondaires

Dans cette étude, les modes d'écoulement et les distributions de flux sont d'un intérêt car ils jouent un rôle majeur dans le processus d'endommagement du tissu pulmonaire. Il est prévu que les concentrations de contraintes se produisent lors des pics de débit de l'écoulement secondaire. L'intensité des flux secondaires ζ à certaines sections peuvent être évaluées par :

$$\zeta = \frac{\int_S \bar{v}_s \cdot dS}{\int_S \bar{v}_p \cdot dS} \quad (5.1)$$

où S est la surface d'une section transversale donnée, $\bar{v}_s = \sqrt{v_{s1}^2 + v_{s2}^2}$ est la vitesse secondaire moyenne, v_{s1} et v_{s2} sont les composantes de la vitesse perpendiculaire à la direction d'écou-

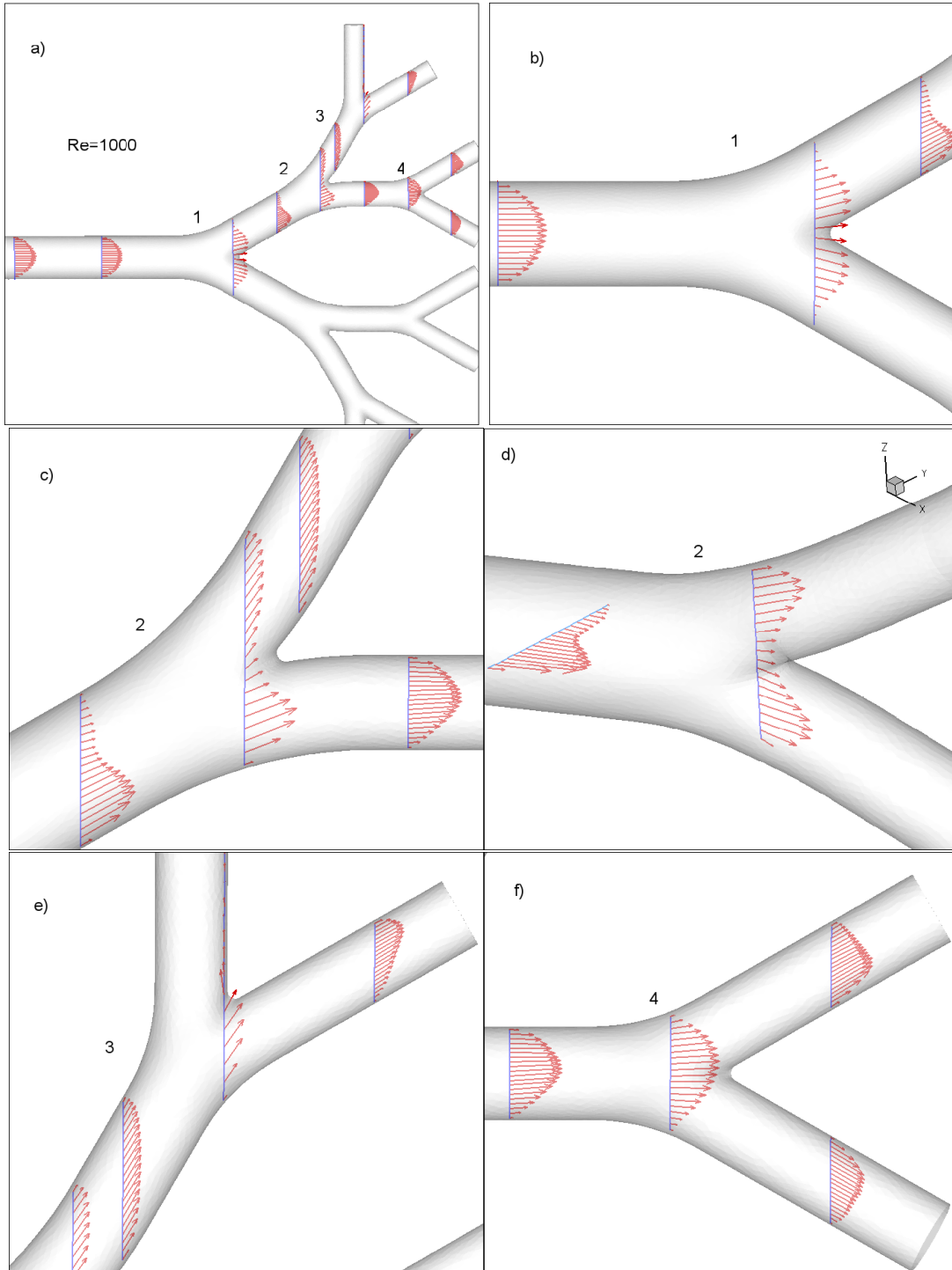


FIGURE 5.5 – Vecteurs vitesse axiale à $Re_{D_{inlet}}=1000$: (a) sur une configuration plane, au niveau des bifurcations (b), (c), (e) et (f); (d) sur un modèle hors-plan 1 au niveau de la seconde bifurcation.

ment axial et \bar{v}_p est l'amplitude de la vitesse axiale. Le flux secondaire représente donc le débit plan observé dans une section transversale perpendiculaire à l'axe de l'écoulement. Dans une géométrie courbée, il y a un déséquilibre entre le gradient de pression radial et la force centrifuge due à l'écoulement circonférentiel. Ce déséquilibre entraîne un flux secondaire de type écoulement de Dean caractérisé par une paire de tourbillons contrarotatifs (Dean 1927, 1928).

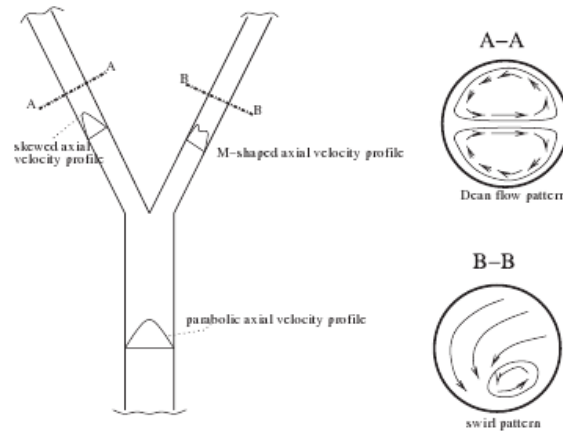


FIGURE 5.6 – Représentation graphique des types d'écoulement d'air axial et secondaire dans le poumon (Wolfgang & Rabczuk, 2008).

Des études numériques sur les écoulements de bifurcation des modèles de poumons ont constamment identifié différents types de modes d'écoulement secondaires comme formes d'écoulement de Dean (Dean flow pattern) ou de tourbillon (swirl pattern) (Fig. 5.6). Des représentations du profil parabolique, biaisée et en forme de M sont généralement observés dans la direction axiale. Bien que les profils d'écoulement paraboliques caractérisent des écoulements à faible nombre de Reynolds, des profils d'écoulement axiaux en forme de M ont été observées pour les écoulements à nombre de Reynolds plus élevés. Les études sur des modèles de Weibel (1963) symétrique ont mis en évidence la présence un écoulement de Dean dans les cylindres-filles pendant qu'un modèle de tourbillon faussée a été observée dans les bifurcations suivantes, c.f. par exemple Comer, Kleinstreuer & Zhang (2001) et Nowak et al. (2003).

Les résultats pour $Re_{D_{inlet}}=1000$ sont montrés pour illustrer le comportement général de l'écoulement à différentes sections des générations dans les configurations tridimensionnelles

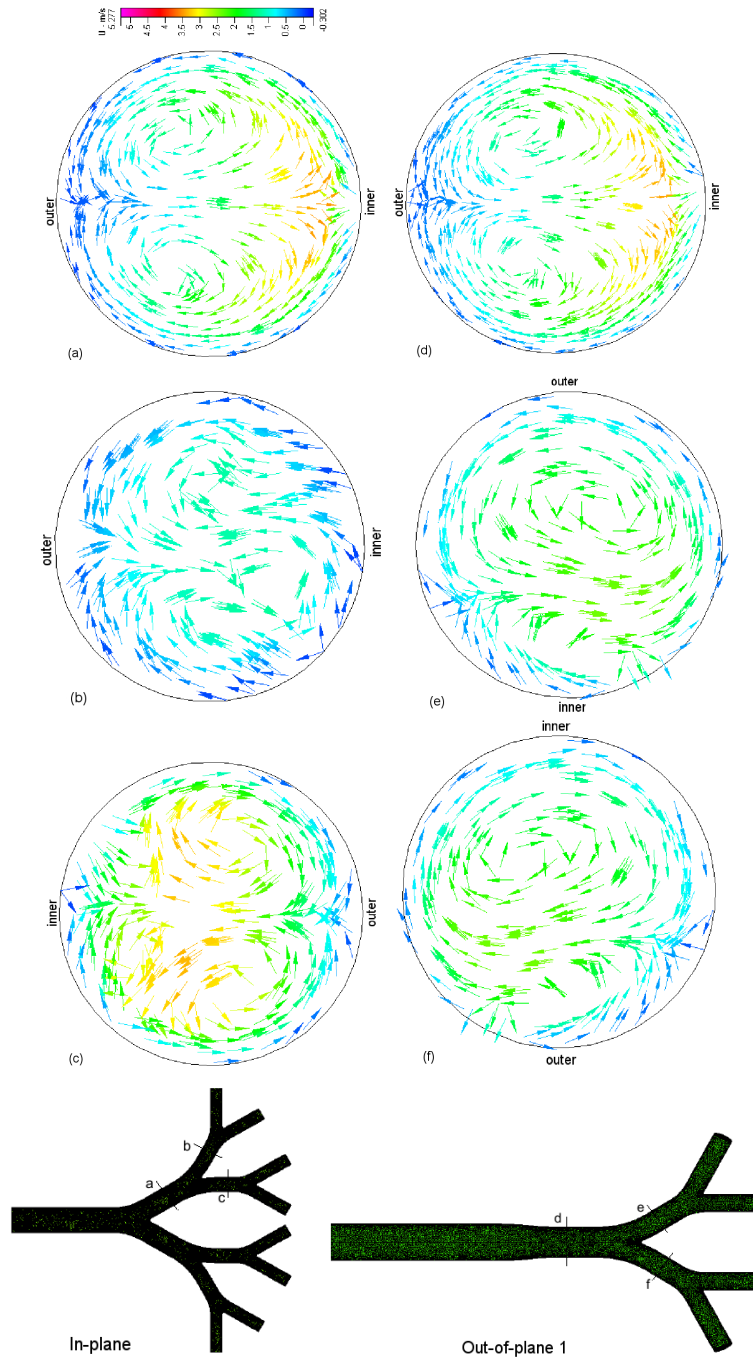


FIGURE 5.7 – Vecteurs flux secondaires : (a) au milieu de $G4$, (b) au milieu de $G5$ externe et (c) au milieu de $G5$ interne (voir (a), (b) et (c) dans le modèle plan en bas à gauche); (d) au milieu de $G4$, (e) au milieu de $G5$ supérieure et (f) au milieu de $G5$ inférieure (voir (d), (e) et (f) dans le modèle hors-plan 1 en bas à droite).

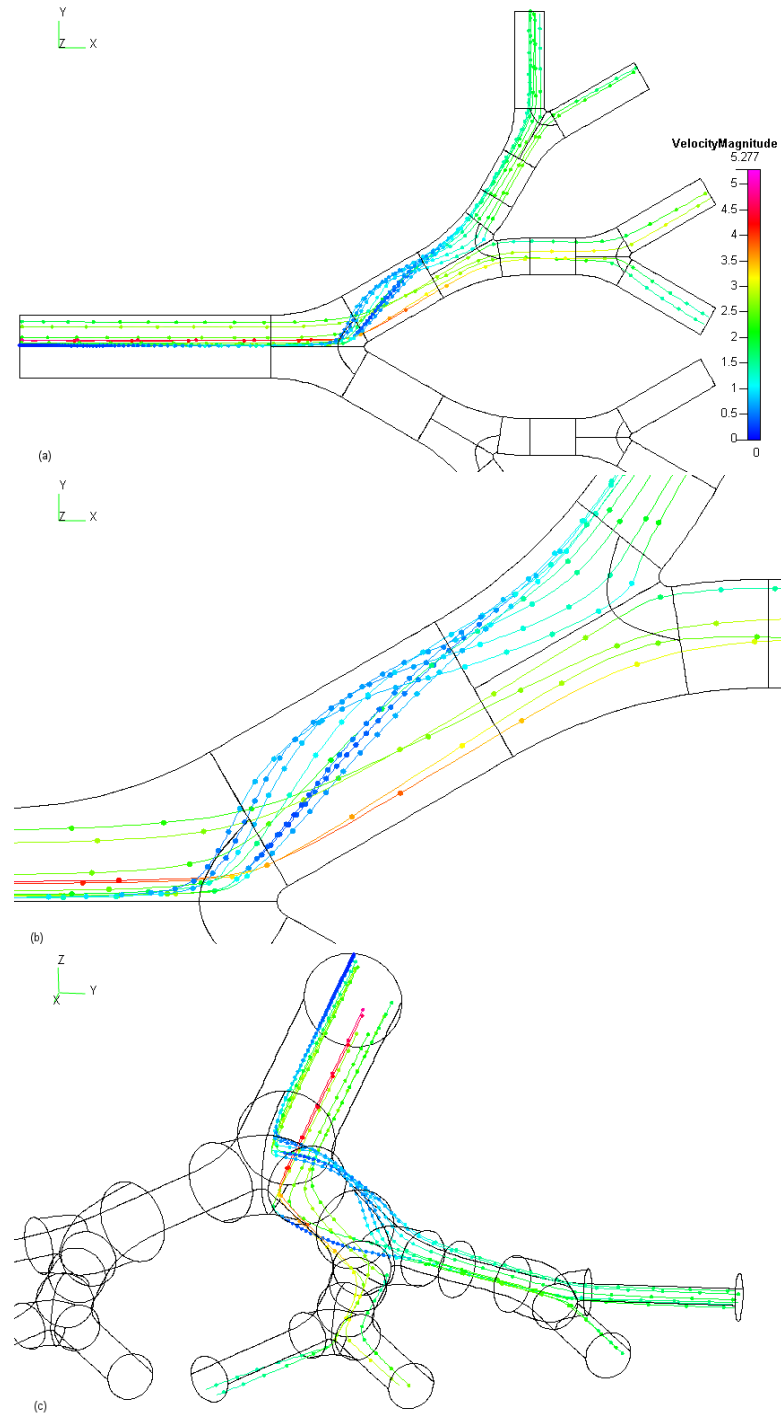


FIGURE 5.8 – Vue tridimensionnelle de zone de recirculation des flux secondaires pour $Re_{D_{inlet}}=1\ 000$ dans une configuration plane.

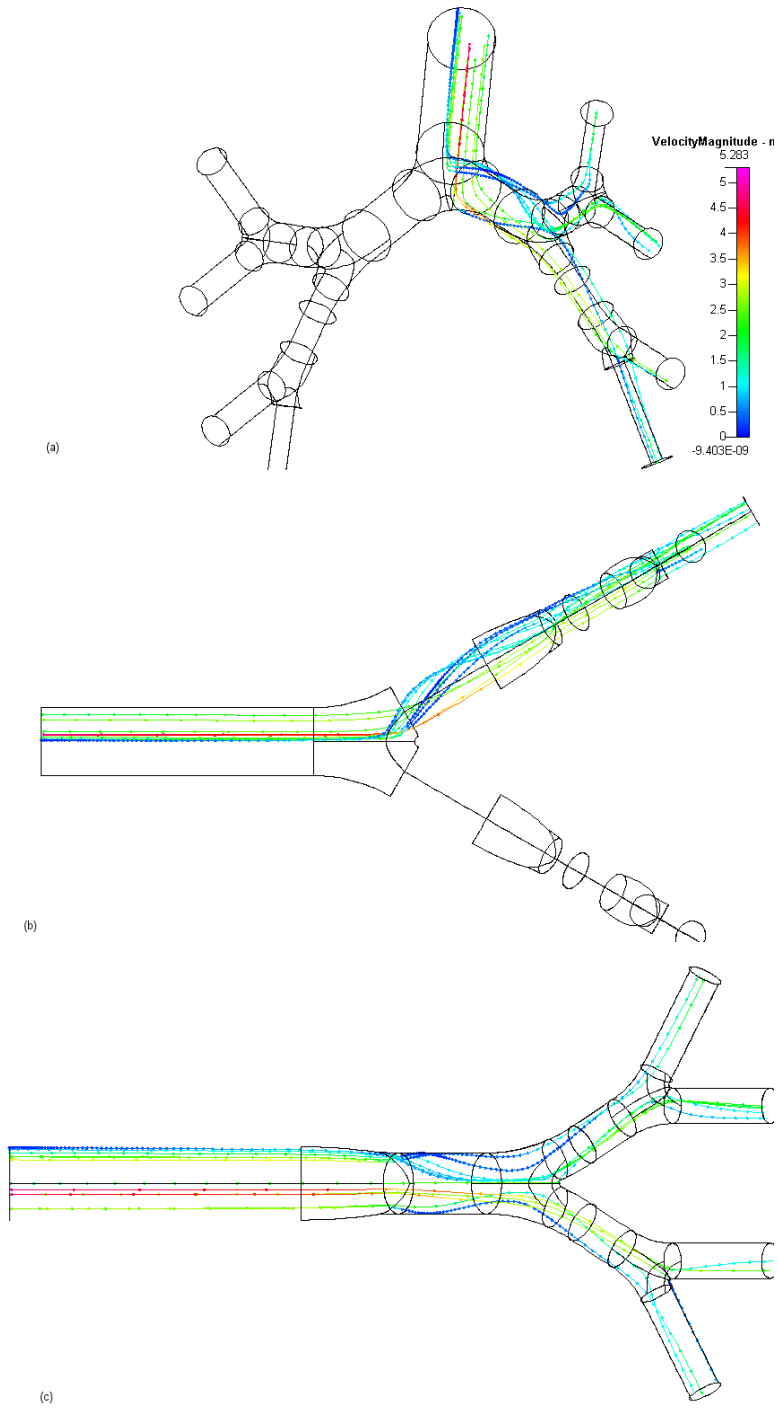


FIGURE 5.9 – Vue tridimensionnelle de zone de recirculation des flux secondaires pour $Re_{D_{inlet}}=1\ 000$ dans une configuration hors-plane 2.

plane et hors-plan 1 des voies aériennes (Fig. 5.7). Les vecteurs flux secondaires sont clairement identifiés dans ces différentes coupes de sections orthogonales à la direction de l'écoulement. Dans la branche de la seconde génération (Figs. 5.7(a) et (d)), le fluide dans le milieu de la voie aérienne de $G4$ se déplace le long du diamètre, impacte sur la paroi interne, puis se divise en deux et se déplace de façon symétrique le long de la paroi pour fusionner au niveau de la paroi externe du tube. Ce type d'écoulement ainsi observé forme une paire de deux tourbillons contrarotatifs, qui sont semblables à ceux de tubes cintrés (Dean, 1927; 1928). Pour le modèle plan, deux tourbillons contrarotatifs sont encore visibles au milieu de la branche de la troisième génération interne. Toutefois, l'écoulement secondaire est beaucoup plus faible à la branche externe que dans la branche interne de la troisième génération (Figs. 5.7(b) et (c)). Comparé aux tourbillons de la deuxième génération, le sens de rotation du tourbillon change en raison de la courbure de la branche. Pour le modèle hors-plan 1 à la troisième génération, les deux tourbillons contrarotatifs se divisent avec un tourbillon d'entrée dans une branche et un tourbillon secondaire dans une autre branche. Par conséquent l'écoulement secondaire est caractérisé par un unique tourbillon dominant. Les tourbillons sont déformés du même côté, comme le montrent les Figs. 5.7(e) et (f).

1.3 Distribution de la pression

La chute de pression dans les bifurcations des voies aériennes joue un rôle important dans le processus respiratoire. Le processus respiratoire ne peut avoir lieu sans cesse et a lieu normalement lorsque la contraction et l'expansion alternative des muscles respiratoires surmonte la chute de pression due aux pertes visqueuses.

Dans cette partie, la chute de pression dimensionnelle Δp^* dans les voies aériennes est définie par Liu et al. (2002) comme :

$$\Delta p^* = (p_{in,total} - p_{out,total})\rho U^2 \quad (5.2)$$

où $p_{in,total}$ est l'intégrale de la pression totale à l'entrée de la conduite du cylindre-parent et

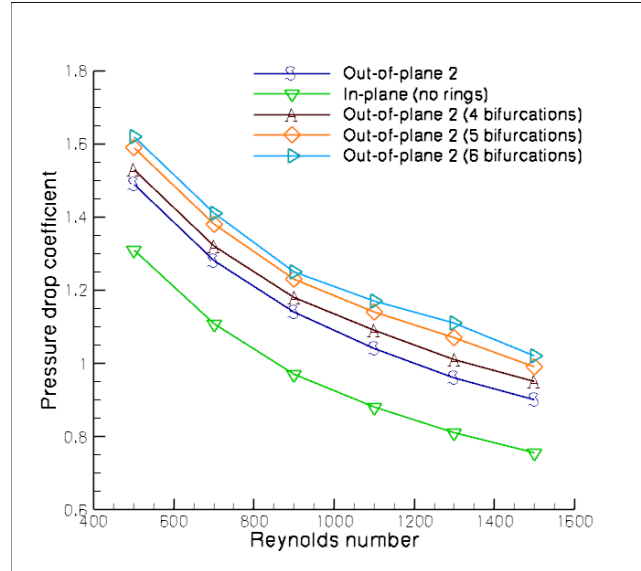


FIGURE 5.10 – Variation du coefficient de chute de pression C_p avec $Re_{D_{inlet}}$.

$p_{out,total}$ est l'intégrale de la pression totale dans les conduites des sorties et ont pour expression :

$$p_{in,total} = \frac{\int_{S_{in}} (p + 0.5\rho\mathbf{u}\cdot\mathbf{u})\rho\mathbf{u}\cdot dS_{in}}{\int_{S_{in}} \rho\mathbf{u}\cdot dS_{in}} \quad (5.3)$$

et

$$p_{out,total} = \frac{\int_{S_{out}} (p + 0.5\rho\mathbf{u}\cdot\mathbf{u})\rho\mathbf{u}\cdot dS_{out}}{\int_{S_{out}} \rho\mathbf{u}\cdot dS_{out}} \quad (5.4)$$

Le coefficient du chute de pression C_p est définie comme :

$$C_p = \frac{\Delta p_{total}}{p_{in,dynamic}} = \frac{p_{in,total} - p_{out,total}}{p_{in,dynamic}} \quad (5.5)$$

où $p_{in,dynamic}$ est la pression dynamique à l'entrée de la conduite :

$$p_{in,dynamic} = \frac{\int_{S_{in}} (0.5\rho\mathbf{u}\cdot\mathbf{u})\rho\mathbf{u}\cdot dS_{in}}{\int_{S_{in}} \rho\mathbf{u}\cdot dS_{in}} \quad (5.6)$$

La variation du coefficient de chute de pression C_p avec $Re_{D_{inlet}}$ pour différents modèles est représentée sur la Fig. 5.10. Généralement, le coefficient de chute de pression C_p diminue fortement avec l'augmentation du nombre de Reynolds $Re_{D_{inlet}}$. La distribution du C_p pour les modèles hors-plan sont assez semblables, mais le C_p du modèle plan est beaucoup plus faible que les autres modèles. L'explication la plus probable de ce phénomène peut-être que l'angle intervenant dans les modèles hors-plan augmente la chute de pression.

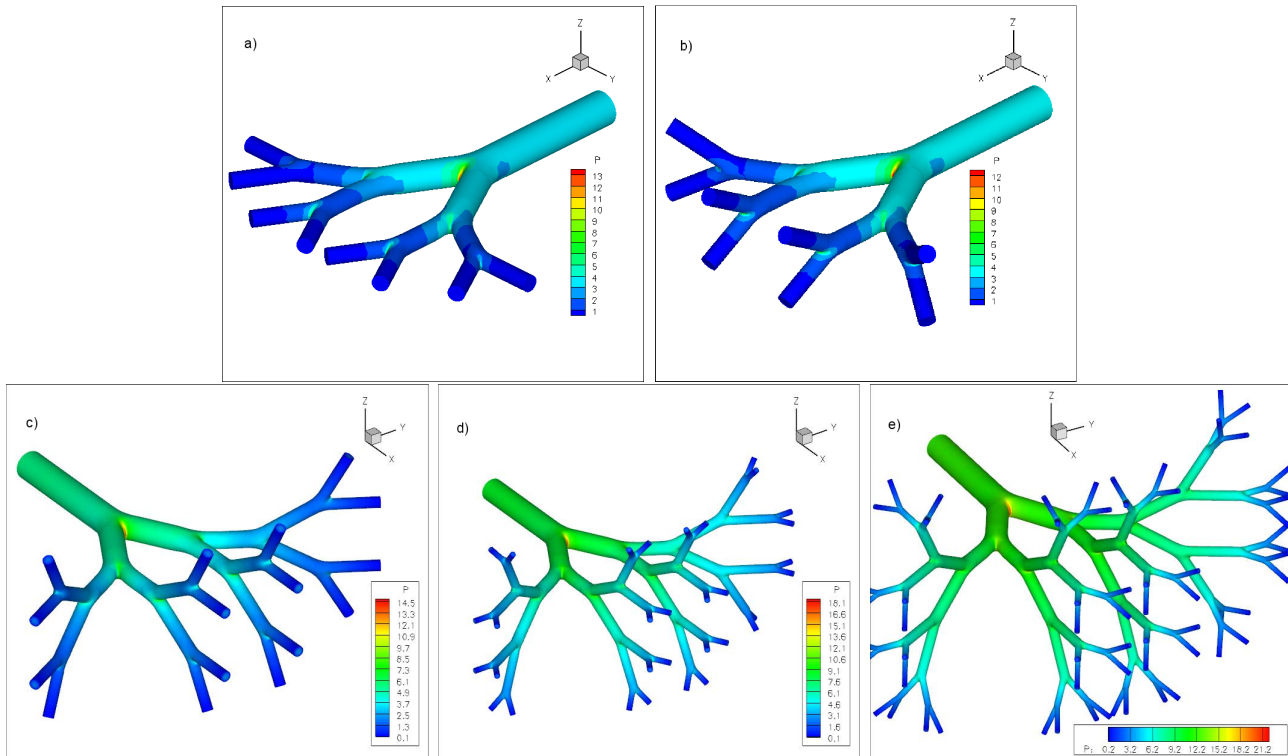


FIGURE 5.11 – Contours de la pression statique sur la paroi des voies aériennes de l’arbre bronchique : (a) modèle plan de $G3 - G6$, (b) modèle hors-plan 1 de $G3 - G6$, (c) modèle hors-plan 1 de $G3 - G7$, (d) modèle hors-plan 1 de $G3 - G8$ et (e) modèle hors-plan 1 de $G3 - G9$.

1.4 Transport et dépôt des particules²

Les particules, au nombre de 19 000 réparties de façon concentrique, sont lâchées à l’entrée du modèle. L’écoulement étant stationnaire, un calcul instationnaire de suivi lagrangien des particules est effectué en gelant les vitesses et la pression. La convergence en pas de temps a été assurée. Dans ce qui suit, nous allons discuter et analyser le comportement des particules transportées dans les conduites cylindriques ainsi que l’efficacité du dépôt.

2. Ilmi Robleh, H., Hoarau, Y., Dušek, J., Particle transport and deposition in the tracheobronchial airway. Présentation orale. EFMC8. *The 8th Euromech Fluid Mechanics Conference*, Bad Reichenhall (Germany), 13-16 Septembre 2010.

1.4.1 Comportement de particules transportées

La Fig. 5.12 représente l'évolution temporelle de la dispersion et de dépôt des particules au $Re_{D_{inlet}} = 500$ et $St = 0.02$. En fonction de leur inertie, certaines particules ont tendance à se déposer dans les bifurcations tandis que d'autres vont continuer leur trajectoire et quitter le domaine de calcul (voir Fig. 5.12). Une vue en demi-plan tridimensionnelle des distributions instantanées des particules et du dépôt de surface est représentée dans la Fig. 5.12.

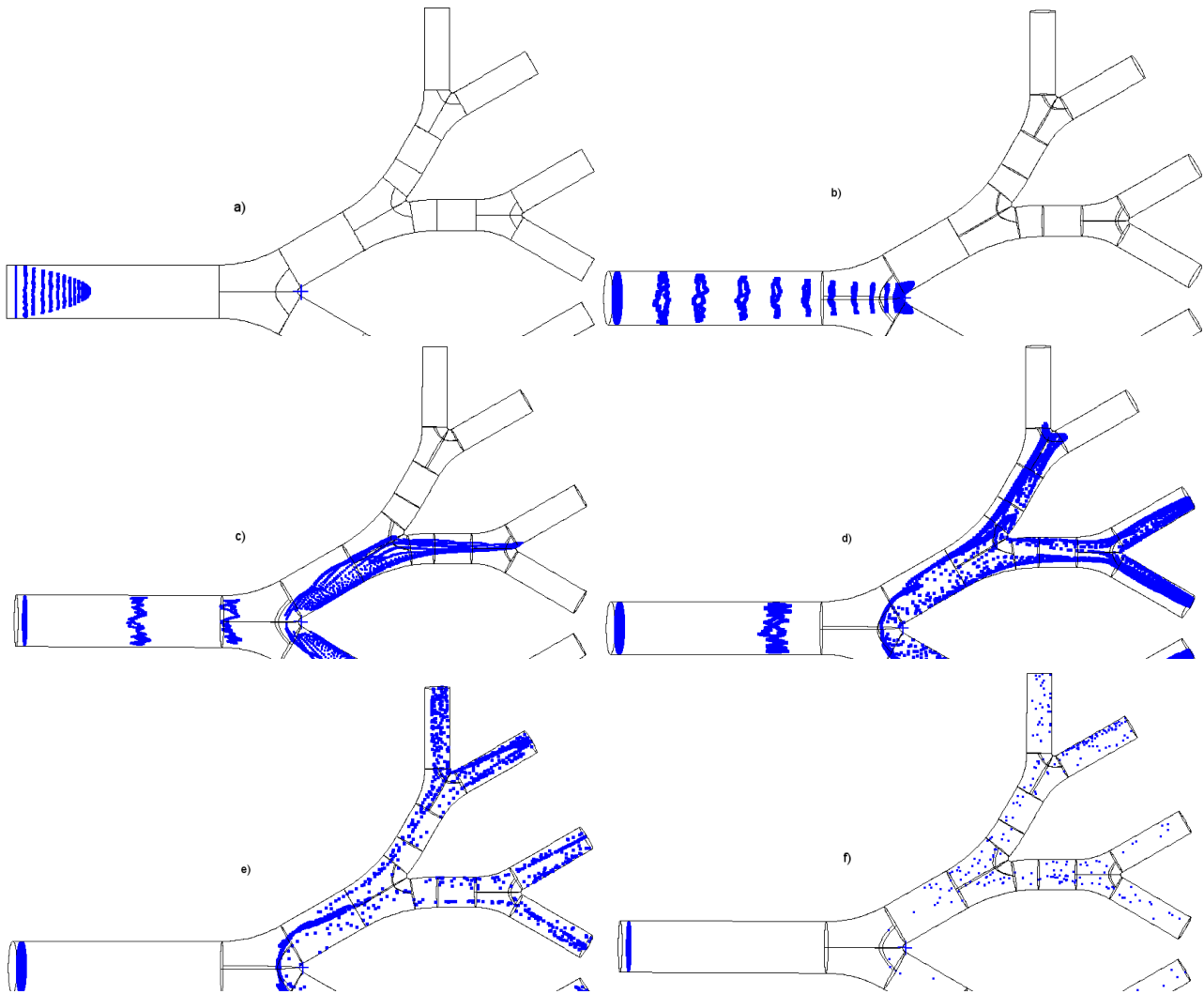


FIGURE 5.12 – Positions des particules à différents instants de temps au cours du débit inspiratoire ($Re_{D_{inlet}} = 500$ & $St = 0.02$) : (a) $t = 0.005s$, (b) $t = 0.06s$, (c) $t = 0.08s$, (d) $t = 0.1s$, (e) $t = 0.12s$ et (f) $t = 0.15s$.

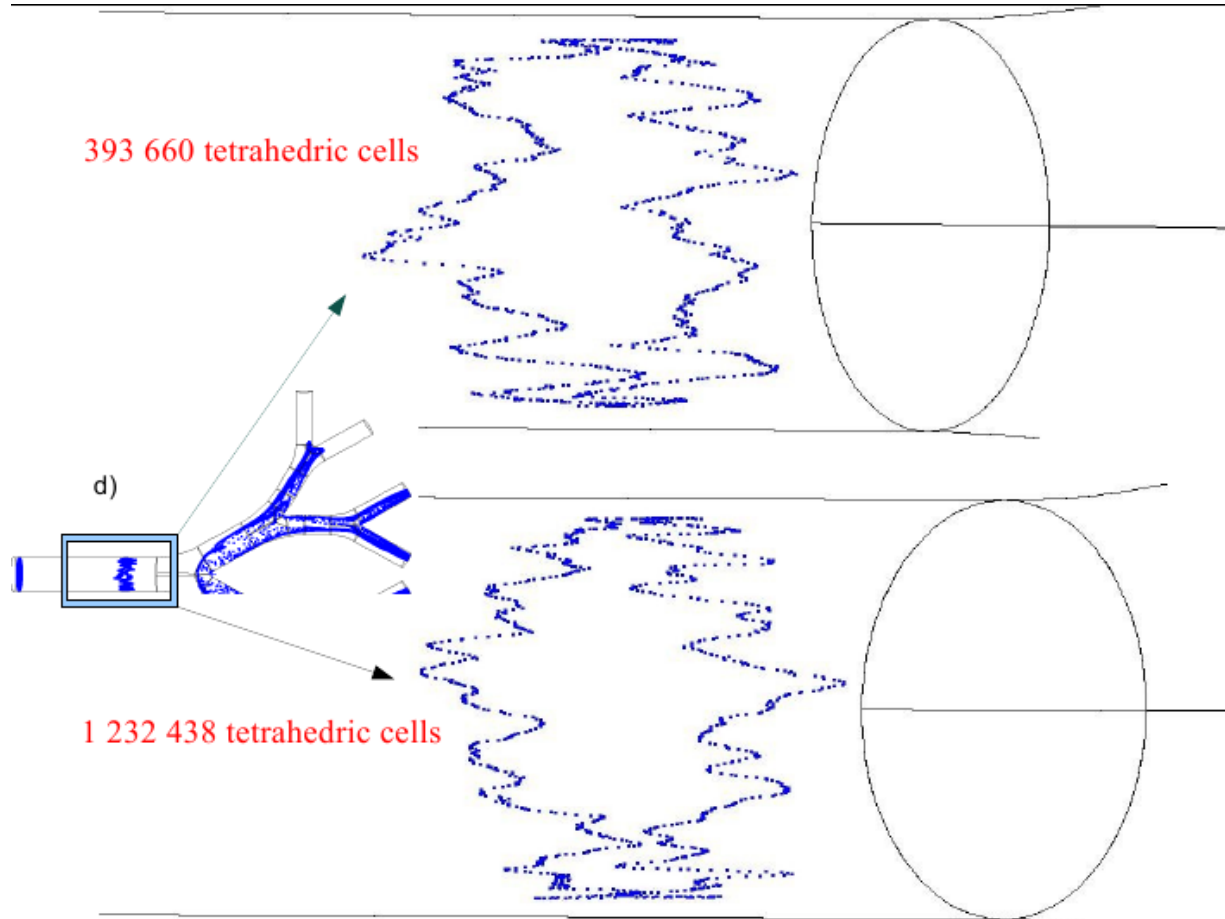


FIGURE 5.13 – Zoom sur les particules observées près de la paroi du cylindre-parent (voir Fig. 5.12(d)).

Entraînée par la convection, la distribution des particules observée près de l'entrée à $t = t_1 = 0.005s$, suit le profil parabolique de vitesse de l'air à l'entrée, juste après la libération. Il est à noter que les particules introduites initialement dans la zone proche paroi se déplacent lentement et vont se déposer plus tard, soit après le temps t_1 . Le nuage des particules libérées à l'entrée à $t = t_0$ se divise de façon symétrique à la première bifurcation après seulement $0.075s$, puis entre au second cylindre-fille interne $G5$, (Fig. 4.1), à l'instant $t = 0.08s$. Au temps $t = 0.1s$, la troisième bifurcation interne a été atteinte, et à $t = 0.12s$ le nuage de particules initial s'est réparti dans les voies aériennes à triple bifurcation avec des particules se déplaçant lentement encore dans le cylindre-parent ou dans le premier cylindre-fille près de la paroi. A $t = 0.15s$, la plupart des particules ont atteint la sortie du domaine de calcul (Fig. 5.12(f)).

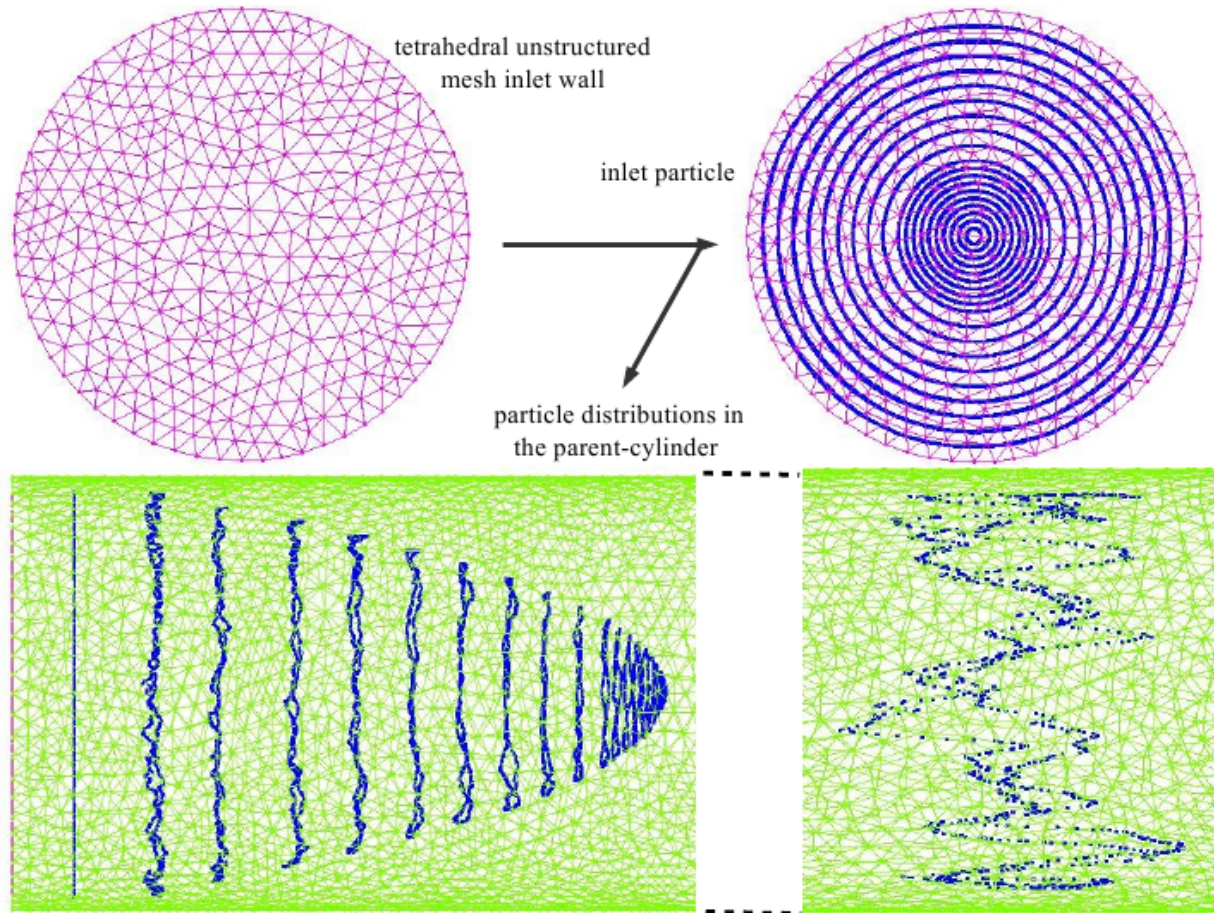


FIGURE 5.14 – Comportement des particules libérées proche paroi à maillage tétraédrique non-structuré (voir Figs. 5.12(a) et (d)).

La Fig. 5.14 représente un zoom sur la distribution des particules, apparemment aléatoire observée proche paroi du conduit-parent. L'étude de la comparaison sur deux maillages différents à l'instant $t = 0.1s$ (voir Fig. 5.12(d)) montre des résultats similaires. La dispersion est due aux cellules non-structurées et la différence par rapport à un maillage structuré (Fig. 2.12) est significative. Cette dispersion s'explique par le manque de finesse du maillage dans les régions proche-paroi. Il est à noter que le raffinement du maillage dans les régions pariétales est très délicat en non-structuré et très mal géré par le mailleur *CFD – GEOM* utilisé ici. L'idéal serait de générer un maillage structuré ou tout au moins en forme de parallélépipède près des parois mais là encore le mailleur utilisé s'est révélé défaillant.

Les vues de surface en *3D* des modes de dépôt final des particules aux nombres de Stokes

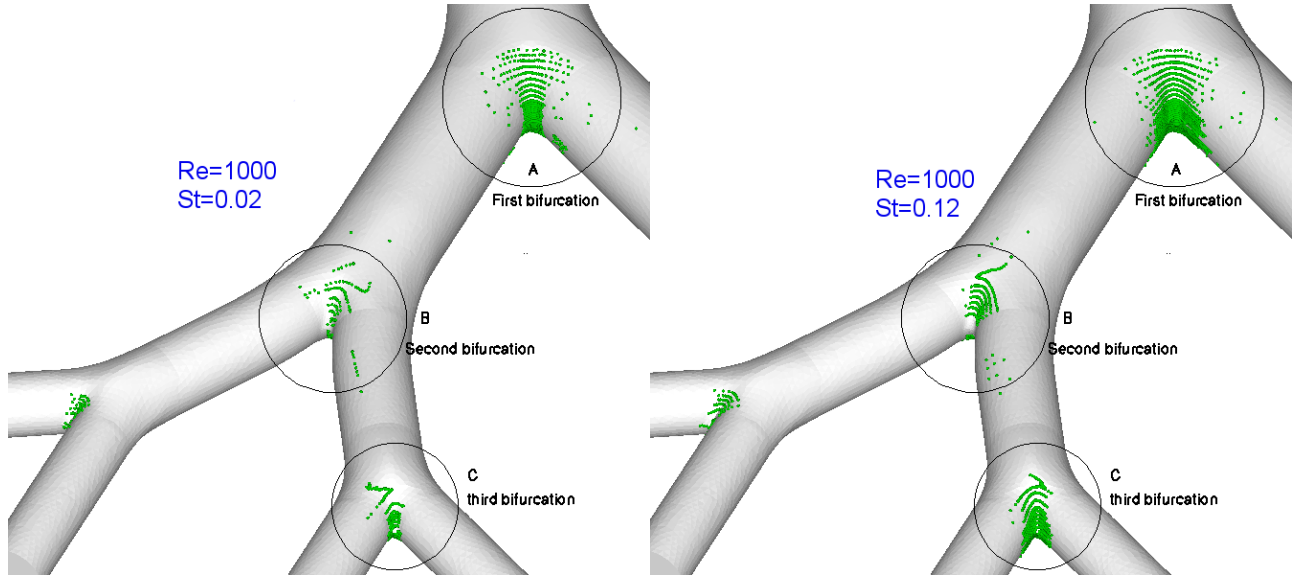


FIGURE 5.15 – Vues en trois dimensions des modes de dépôt local des particules sous inhalation régulière pour $Re_{D_{inlet}}=1000$.

d'admission $St = 0.02$ et 0.12 , sous respiration régulière, sont représentées dans la Fig. 5.15. Les dépôts des particules sont repérés essentiellement sur les surfaces au niveau des bifurcations. Leur nombre augmente avec le nombre de Stokes croissant. À cause des profils de vitesse asymétrique, la troisième bifurcation interne recueille une plus grande quantité de particules déposées à la paroi par rapport à la troisième bifurcation externe. Les caractéristiques des dépôts asymétriques à la seconde bifurcation et la zone de concentration de flux des particules à la seconde et troisième bifurcation sont clairement exposées dans les vues locales de surface en 3D de B et C de la Fig. 5.15.

La figure 5.16 montre les dépôts observés à la fin de la simulation numérique pour trois configurations géométriques. Des dépôts massifs ont lieu exclusivement au niveau des bifurcations et plus on s'enfonce dans les conduits moins il y a de dépôt des particules. Toutefois, en faisant varier le nombre de Reynolds, on constate, qu'à $Re_{D_{inlet}}=1500$, la concentration de dépôt des particules est plus dense comparée aux autres. Les particules dans les voies respiratoires suivent les trajectoires de l'air (Fig. 2.12), jusqu'au moment où elles divergent autour de la bifurcation. Les particules ayant une faible densité (ρ_p faible) continuent leur chemin par contre celles dont la densité est élevée (ρ_p élevée) quittent les lignes de courant et vont impacter la paroi de la

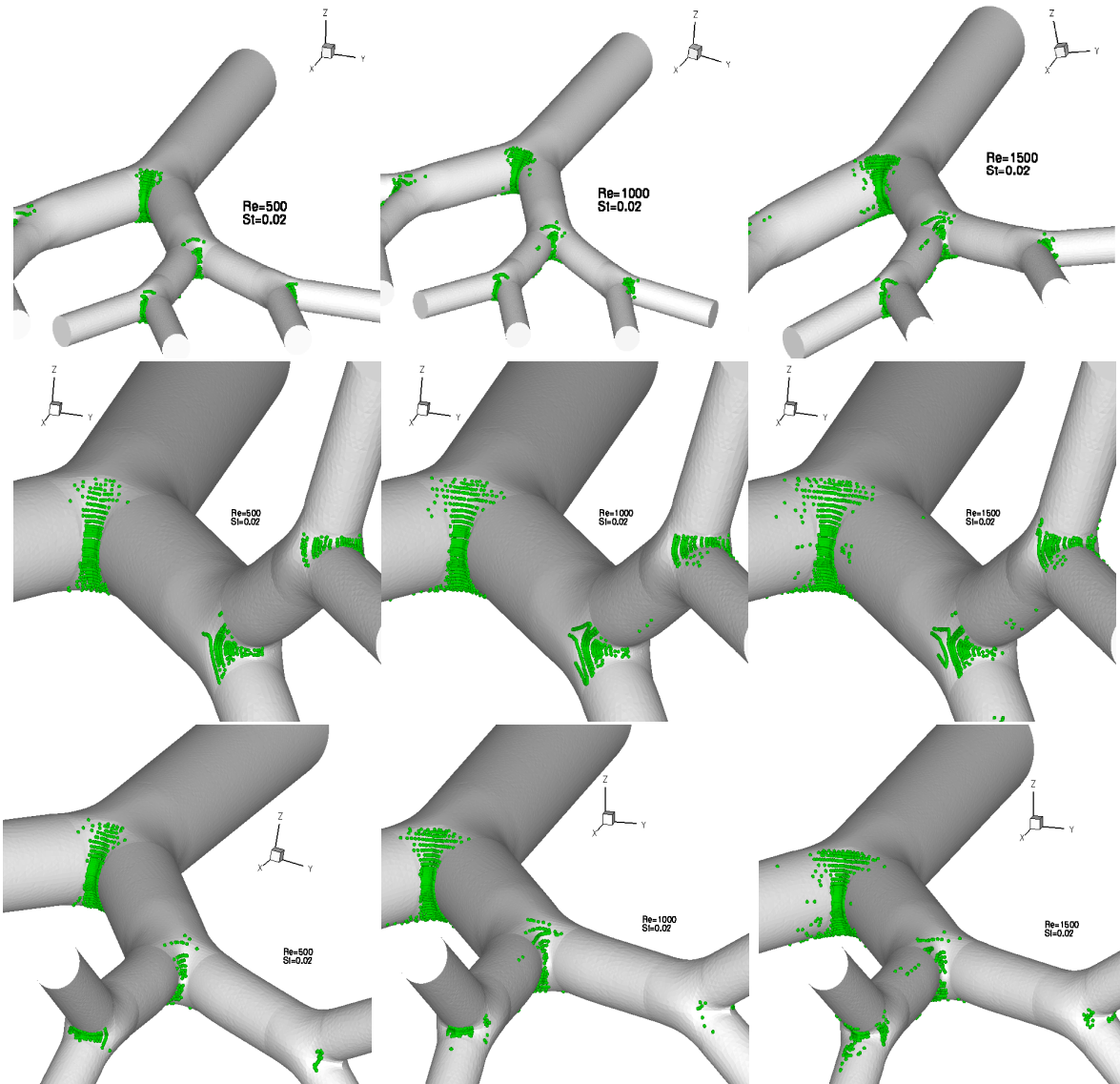


FIGURE 5.16 – Modes de dépôt des particules dans les différentes bifurcations de trois types de configurations de génération $G3$ - $G6$.

bifurcation. Ce type de mécanisme est généralement quantifié par le nombre de Stokes, défini comme le rapport entre le temps caractéristique de la disparition de la vitesse de glissement et le temps basé sur le diamètre du conduit parent et la vitesse à l'entrée. L'effet du nombre de Stokes est étudié au prochain paragraphe.

1.4.2 Efficacité de dépôt des particules

L'efficacité de dépôt des particules (DE) est définie comme le rapport entre le nombre des particules déposées dans une région donnée et le nombre des particules initialement admises dans la génération ($G3$). Ainsi, les Figs. 5.17 et 5.18 montrent les comparaisons des efficacités de dépôt des particules (en %) en fonction du nombre de Stokes d'admission (St) compris entre 0.02 et 0.12. Ces calculs numériques sont effectués pour des configurations à triple bifurcation pour $Re_{D_{inlet}} = 500$, $Re_{D_{inlet}} = 1\ 000$ et $Re_{D_{inlet}} = 1\ 500$. Deux cas sont considérés : pour **l'ensemble des bifurcations** d'une part (Fig. 5.17) et pour **chaque bifurcation donnée** d'autre part (Fig. 5.18).

Ensemble des bifurcations

La Fig. 5.17 montre l'efficacité de dépôt des particules des modèles à triple bifurcation pour toutes les bifurcations pour différents nombres de Reynolds $Re_{D_{inlet}} = 500$ (Fig. 5.17(a)), $Re_{D_{inlet}} = 1\ 000$ (Fig. 5.17(b)) et $Re_{D_{inlet}} = 1\ 500$ (Fig. 5.17(c)). D'une manière générale, l'efficacité de dépôt est croissante avec l'augmentation du nombre de Reynolds (5%) et du nombre de Stokes. Deux cas peuvent être observés :

- pour $0.02 \leq St \leq 0.08$, l'efficacité de dépôt des particules (%) du modèle hors-plan 1 est plus importante que celle des autres modèles. Les particules légères sont très influencées par la présence des tourbillons de Dean.

- au-delà de $St = 0.08$, les différences sont minimales pour toutes les configurations.

La géométrie a donc un effet non négligeable sur l'efficacité de dépôt car la configuration hors-plan 1 recueillerait le plus grand nombre de particules déposées dans les voies aériennes.

Bifurcations individuelles

$Re_{D_{inlet}} = 500$

Les Figs. 5.18(a), (b) et (c) représentent l'efficacité de dépôt des particules cas $Re_{D_{inlet}} = 500$. Les différences en terme d'efficacité de dépôt sont minimales entre les différentes configurations (voir Fig. 5.18(a)). Cependant, plus le nombre de Stokes augmente et plus le dépôt est considé-

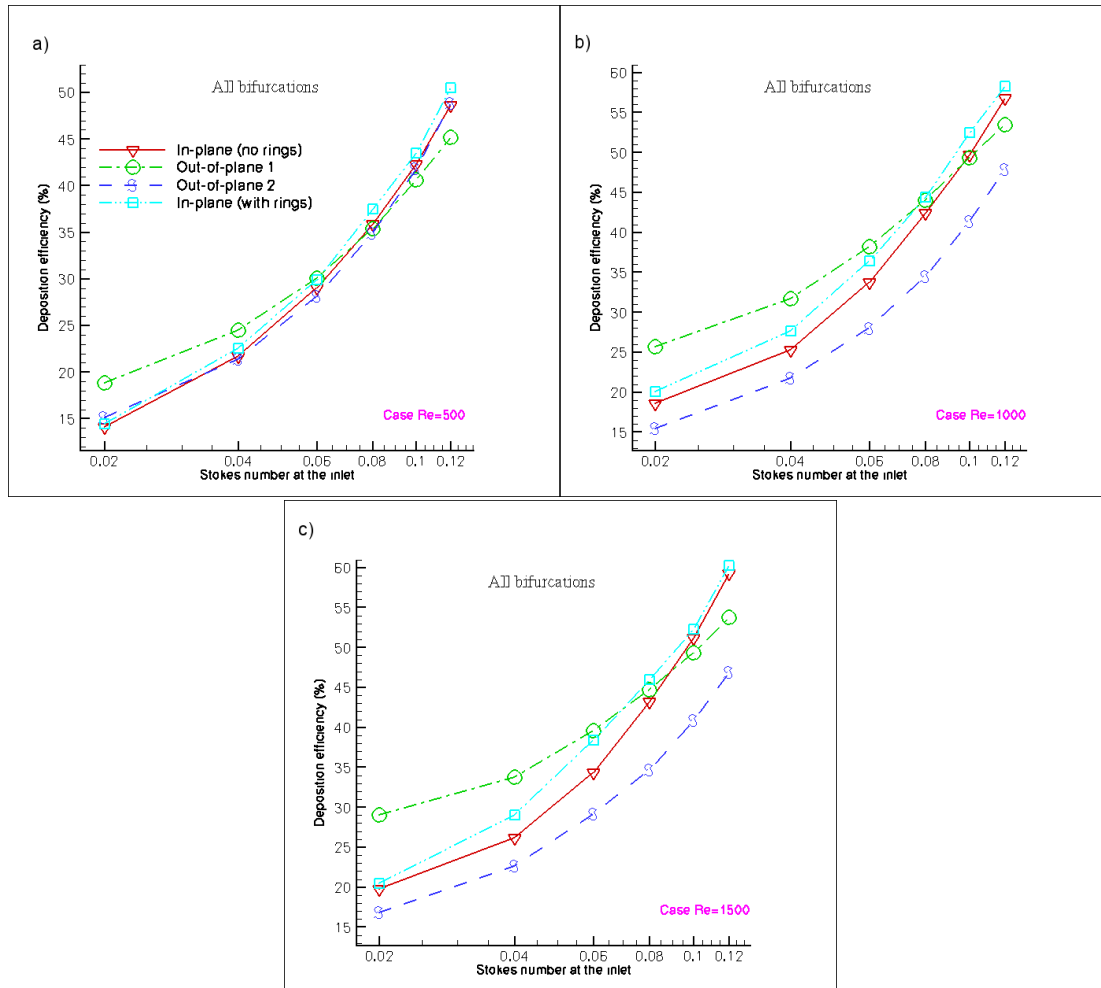


FIGURE 5.17 – Efficacités de dépôt des particules à l’ensemble des bifurcations : (a) $Re_{D_{inlet}} = 500$, (b) $Re_{D_{inlet}} = 1000$ et (c) $Re_{D_{inlet}} = 1500$.

table ce qui est consistant avec un mode préférentiel de dépôt de type inertiel. Même remarque est à souligner dans les Figs. 5.18(b) et (c) à l’exception de la configuration hors-plane 1. Le dépôt des particules observé dans cette dernière au niveau de la seconde bifurcation est 3 fois supérieur au dépôt des autres modèles. Cela est dû au flux secondaire induit par la non-planéité de la géométrie.

$$\underline{Re_{D_{inlet}} = 1000}$$

Le cas de $Re_{D_{inlet}} = 1000$ est représenté sur les Figs. 5.18(d), (e) et (f). La grande différence en termes de caractéristiques de dépôt des particules entre les configurations plane et hors-

plane se trouve à la seconde bifurcation. Les vecteurs flux secondaires présentés plus-haut sont responsables de cette différence très nette d'efficacité de dépôt des particules observée entre la configuration hors-plane 1 et les autres.

$$\underline{Re_{D_{inlet}}=1\,500}$$

Les Figs. 5.18(g), (h) et (i) représentent l'efficacité de dépôt pour chaque jonction (cas $Re_{D_{inlet}}=1\,500$). Les mêmes remarques qu'au niveau de la première et seconde bifurcation s'observent sur ce niveau de région.

D'un point de vue général, l'efficacité de dépôt augmente avec la vitesse et le nombre de Stokes, ce qui démontre l'importance de l'écoulement et de l'inertie des particules dans les voies aériennes. La majorité des particules déposées sont récoltées au niveau de la première bifurcation. La seconde bifurcation du modèle hors-plan 1 recueille un dépôt considérable comparé aux autres modèles. Les écoulements secondaires ont un effet non négligeable sur le dépôt des particules. Ces résultats confirment l'importance du mécanisme d'impact inertiel qui détermine les modes de dépôt des particules et leurs concentrations sur les surfaces locales.

Influence de la géométrie

En réalité, les voies respiratoires du poumon ne sont pas limitées à un seul plan. Outre la non-planéité de connexions, les bifurcations n'ont pas de plan de symétrie (Sera et al., 2003). Cette asymétrie est généralement ignorée dans les études expérimentales et les simulations présentées dans la littérature. La plupart des chercheurs ont étudié le dépôt des particules pour des configurations planes. La Fig. 5.18 montre clairement l'influence de la géométrie sur les modes de dépôt des particules et plus particulièrement au niveau de la seconde bifurcation. L'angle spatial $\theta = 30^\circ$ joue un rôle très important pour le dépôt des particules puisque l'écoulement responsable du transport des particules dans les conduites est dévié de sa trajectoire initiale et ce changement brutal de direction va entraîner un impact plus important des particules sur la paroi à cet endroit. Cela entraîne un dépôt considérable au niveau de la seconde bifurcation quelque soit la vitesse de l'écoulement.

Influence des anneaux cartilagineux

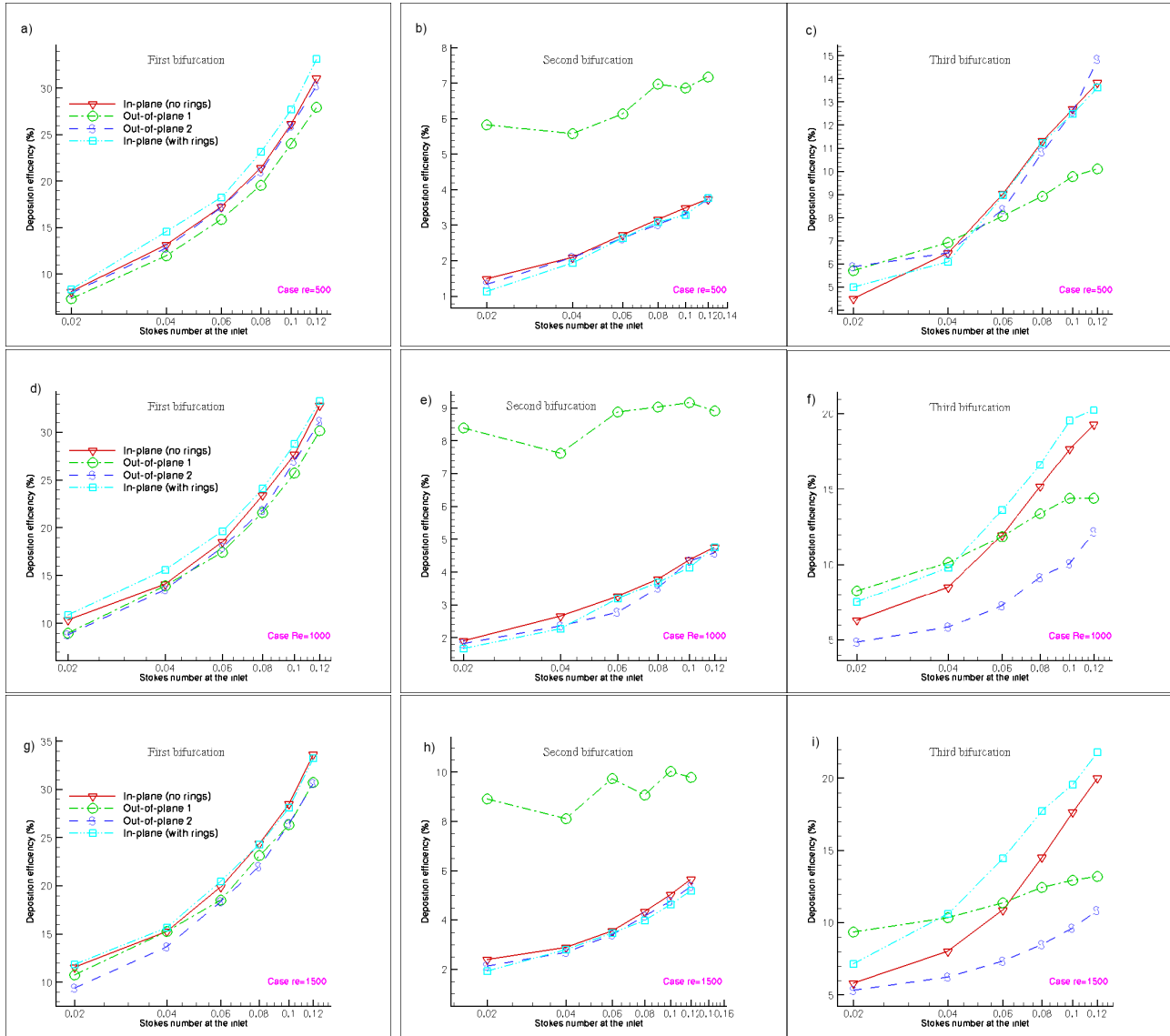


FIGURE 5.18 – Comparaisons des efficacités de dépôt (DE %) des particules en fonction de la bifurcation (en ligne) et du nombre de Reynolds (en colonne) $500 \leq Re_{D_{inlet}} \leq 1500$ pour les quatre modèles bronchiques à triple bifurcation : pour $Re_{D_{inlet}} = 500$ (première ligne), (a) à la première bifurcation, (b) à la seconde bifurcation et (c) à la troisième bifurcation ; pour $Re_{D_{inlet}} = 1000$ (seconde ligne), (d) à la première bifurcation, (e) à la seconde bifurcation et (f) à la troisième bifurcation ; pour $Re_{D_{inlet}} = 1500$ (troisième ligne), (g) à la première bifurcation, (h) à la seconde bifurcation et (i) à la troisième bifurcation.

Les Figs. 5.17 et 5.18 montrent l'effet des anneaux trachéaux sur l'efficacité de dépôt des particules pour le modèle plan sous condition d'entrée stationnaire pour les trois cas considérés ($Re_{D_{inlet}} = 500$, $Re_{D_{inlet}}=1\,000$ et $Re_{D_{inlet}}=1\,500$) à l'ensemble des bifurcations. Dans tous les cas, deux résultats peuvent être tirés :

- pour $Re_{D_{inlet}} = 500$, les différences observées entre les deux configurations sont quasiment nulles, pour l'ensemble des densités des particules.
- quant aux deux autres ($Re_{D_{inlet}}=1\,000$ et $Re_{D_{inlet}}=1\,500$), la courbe de la configuration plane avec anneaux présente un taux d'efficacité de dépôt légèrement plus important que la configuration sans anneaux et ceci pour l'ensemble des densités des particules (surtout à la troisième bifurcation).

L'influence de la structure en anneau cartilagineux n'est pas significatif, les efficacités de dépôt des particules sont assez similaires pour les deux types de configurations, c'est-à-dire, avec et sans anneaux trachéaux, car les vitesses axiales ainsi que les modes d'écoulement au niveau des bifurcations sont très similaires pour l'ensemble des régions. De tels phénomènes sont également observés à chaque bifurcation *A* (Figs. 5.18(a), (d) et (g)), *B* (Figs. 5.18(b), (d) et (h)) et *C* (Figs. 5.18(c), (f) et (i)).

1.4.3 Effet des bifurcations en aval

Nous avons rajouté des bifurcations supplémentaires au modèle hors-plan 2 (Fig. 4.2(d)) pour en faire une géométrie à 4, 5 et 6 bifurcations à l'aide de *CFD-GEOM* (Figs. 4.2(e), (f) et (g)). Ensuite, nous avons évalué l'effet de la présence des bifurcations en aval sur le débit à la sortie de la troisième génération et tracé le *DE* correspondant (voir Fig.5.19(a)).

La Fig. 5.19 montre le dépôt des particules pour différents modèles pour un nombre de Reynolds $Re_{D_{inlet}}=1\,000$. Les calculs numériques de dépôt sont réalisés en se fixant au niveau de la troisième bifurcation juste à la sortie de *G5* pour chaque modèle (Figs. 5.19(b), (c), (d) et (e)). Nous avons par la suite comparé les résultats obtenus en terme d'efficacité de dépôt (*DE*) des particules (Fig. 5.19(a)). La présence des bifurcations en aval sur le débit à la sortie de la troisième génération *G5* ne modifie pas l'écoulement dans les conduites et par conséquent n'affecte pas le dépôt des particules au niveau des bifurcations. La comparaison

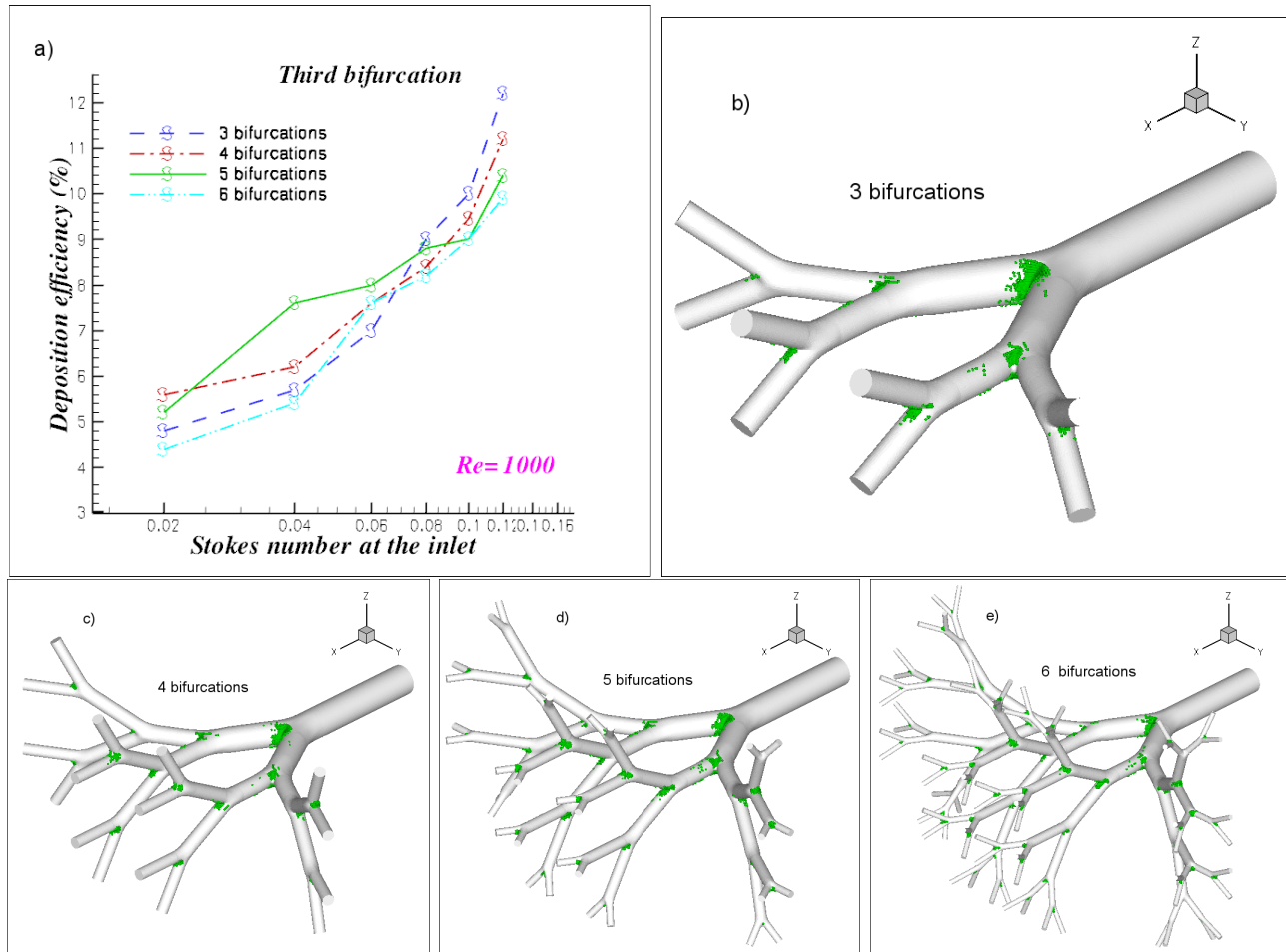


FIGURE 5.19 – Dépôt des particules inhalées dans des modèles hors-plan multigénérationnels : (a) efficacité de dépôt des particules ; sous flux d'inhalation ($Re_{D_{inlet}}=1000$) ; (b) modèle à 4 générations ; (c) modèle à 5 générations ; (d) modèle à 6 générations ; et (e) modèle à 7 générations.

des efficacités de dépôt des particules au niveau de la sortie de la troisième bifurcation, sous inhalation stationnaire, des modèles de trois à six bifurcations, (Fig. 5.19) montre des résultats assez similaires. Donc, le taux de dépôt des particules spécifique dans une bifurcation donnée semble indépendant des générations des configurations. Le dépôt varie très peu et quelque soit la configuration. Donc, augmenter le nombre de générations n'a aucun effet significatif sur l'efficacité de dépôt des particules.

1.4.4 Effet de la seconde bifurcation

La Fig. 5.20 représente le DE des particules pour les mêmes modèles que la Fig. 5.19. Les simulations sont effectuées au niveau de la seconde bifurcation juste à la sortie de $G4$. Le dépôt constaté reste faible mais il apparaît que les différences observés entre les différents modèles multi-générationnels sont minimales.

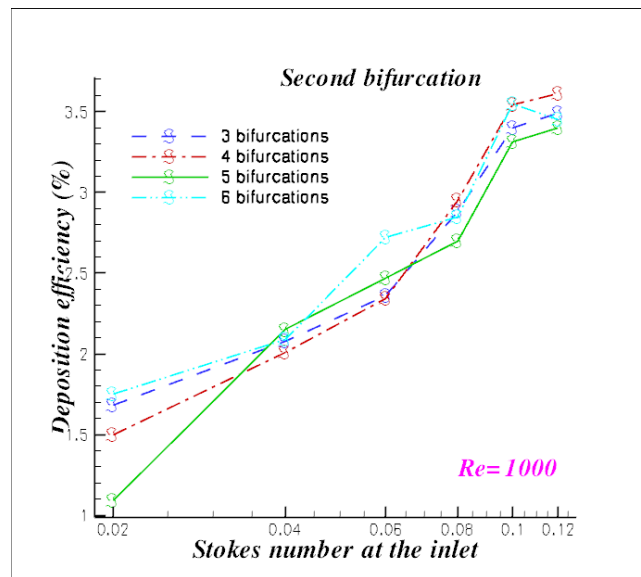


FIGURE 5.20 – Efficacité de dépôt des particules pour différentes configurations.

1.4.5 Efficacité de dépôt des particules pour la totalité des générations

La Fig. 5.21 montre les efficacités de dépôt des particules pour la totalité des générations simulées. L'efficacité de dépôt dans les configurations hors-plane à 3 et à 6 bifurcations sont quasiment similaires et plus faibles qu'aux deux autres modèles. Cette disproportion de dépôt des particules dans ces modèles multi-générationnels peut provenir de la disposition des bifurcations tri-dimensionnelles. L'effet de l'inertie reste fort dans les configurations à 4 et à 5 bifurcations.

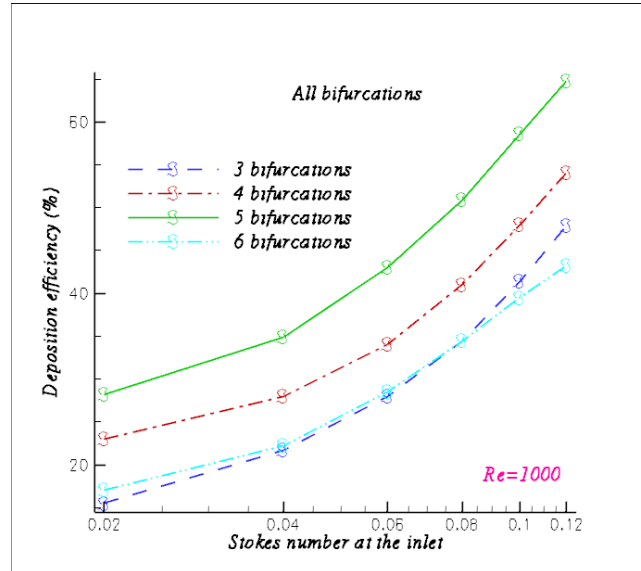


FIGURE 5.21 – Efficacité de dépôt des particules à l’ensemble des bifurcations.

1.5 Conclusion

Le dépôt est essentiellement dû à l’impact inertiel aux parois. La géométrie des configurations et la vitesse de l’écoulement ont un effet non négligeable sur le dépôt des particules dans les bifurcations. Les bifurcations en aval n’ont pas d’effet sur le dépôt à une bifurcation donnée. La grande majorité de dépôt des particules s’observe essentiellement et uniquement au niveau des bifurcations.

2 Simulation dans un écoulement instationnaire

Dans cette partie, les simulations de transport des particules sont effectués dans un écoulement instationnaire de nombre de Reynolds $Re_{D_{inlet}} = \frac{U(t)D_{inlet}}{\nu}$ où $U(t)$ est la vitesse de l’écoulement du fluide d’air et dépend du temps $t(s)$, D_{inlet} est le diamètre du conduit parent et ν est la viscosité cinématique de l’air. Une forme d’onde cyclique de l’inhalation dans des conditions de repos, caractéristique de l’état instationnaire de l’écoulement, est donnée sur la figure 5.22. Le nombre de Reynolds maximal atteint par l’onde d’inhalation est environ 433 (condition d’inhalation au repos). Seule la phase d’inspiration est modélisée car c’est la seule

partie du cycle pertinente pour l'étude du dépôt des particules.

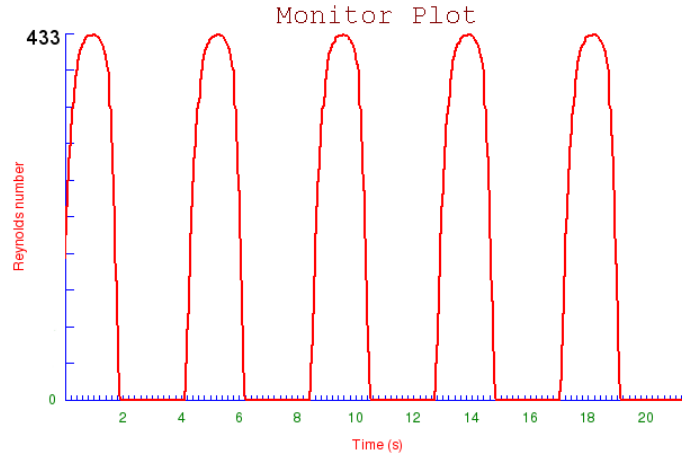


FIGURE 5.22 – Forme d'onde d'entrée du flux.

Le pas de temps de la simulation est supposé constant égal à $0.021505s$. La simulation est obtenue avec 1000 pas de temps. Une seule injection de particules à $t = 0$.

2.1 Écoulement instationnaire

Les caractéristiques de l'écoulement instationnaire et cyclique sont habituellement définis par le nombre de Womersley ($W_o = \frac{D_{inlet}}{2} \sqrt{\frac{\omega}{\nu}}$) et le nombre de Strouhal ($Str = \frac{W_o^2}{Re_{D_{inlet}}}$) où $\frac{D_{inlet}}{2}$ est le rayon de la conduite du cylindre-parent, ω est la fréquence angulaire, et ν est la viscosité cinématique du fluide (voir table 4.3). Pour $W_o < 1$, l'écoulement est quasi-stationnaire, mais pour $W_o \gg 1$ les effets de l'instationnarité sont significatifs et des effets turbulents peuvent apparaître (Womersley, 1957). La transition de laminaire - turbulente est caractérisée par $\frac{Re_{D_{inlet}}}{W_o}$ plutôt que par $Re_{D_{inlet}}$ et la valeur critique se trouve généralement entre $\frac{Re_{D_{inlet}}}{W_o} = 200$ et 500 dans un écoulement de conduite en ramification (Menon et al, 1984; Jan et al, 1989). Dans la présente étude, W_o et $Re_{D_{inlet}}$ varient entre 0.89-0.93 et 433- 1091, respectivement, résultant en $\frac{Re_{D_{inlet}}}{W_o} = 487- 1173$. Ainsi, la turbulence de l'écoulement n'est pas prévue dans nos modèles. Le niveau de turbulence est apparemment faible dans des conditions réelles et ne peut pas avoir d'influence notable sur l'efficacité de dépôt des particules (DE) dans les conduites. La turbulence peut-être induite par le débit moyen de convection (par exemple,

$Re_{D_{inlet}}$) plutôt que par l'oscillation du débit (c'est-à-dire W_o) en raison de faibles valeurs de Strouhal Str . Cela suggère que, dans la gamme de fréquence utilisée, l'oscillation d'écoulement en soi ne peut pas être un facteur important pour le dépôt des particules dans nos modèles actuels.

Nous pouvons également supposer que nous résolvons toutes les échelles spatiales et temporelles d'un écoulement non perturbé à l'entrée de la conduite et que ce dernier ne présente pas de comportement turbulent.

Modos d'écoulement secondaire

L'existence d'un écoulement secondaire a été précédemment démontré. Les modes d'écoulement calculés pour un $Re_{D_{inlet}}$ étudié dans la Fig. 5.23 sont très similaires à ceux de la configuration plane représentée dans la Fig. 5.7. Par conséquent, seuls les résultats du modèle plan pour $Re_{D_{inlet}} = 433$ sont présentés sur la Fig. 5.23 pour illustrer leur comportement général au milieu des différentes branches dans les voies respiratoires dans un écoulement instationnaire. Dans les branches $G4$ et $G5$, un mode d'écoulement secondaire de type Dean est de nouveau clairement identifié. Cet écoulement secondaire est responsable des modes de dépôt des particules observé particulièrement sur le site près de la jonction des bifurcations d'ordre élevé. L'intensité de l'écoulement secondaire augmente avec le nombre de Reynolds.

2.2 Efficacité de dépôt des particules

La Fig. 5.24 représente les efficacités de dépôt (DEs) des particules dans les bifurcations pour les modèles des voies aériennes à quatre générations dans un écoulement instationnaire. Le DE en régime transitoire, est beaucoup plus faible que la DE sous débit constant au nombre de Reynolds d'entrée $Re_{D_{inlet}} = 500$. L'efficacité de dépôt augmente avec le nombre de Stokes croissant (10 à 30%), mais reste de même nettement inférieure à celle observée dans le cas stationnaire (15 à 53%).

Les Figs. 5.25(a), (b) et (c) montre l'efficacité de dépôt des particules en fonction du nombre de Stokes dans chaque bifurcation. Pour cette gamme de nombre de Stokes d'intérêt, les ef-

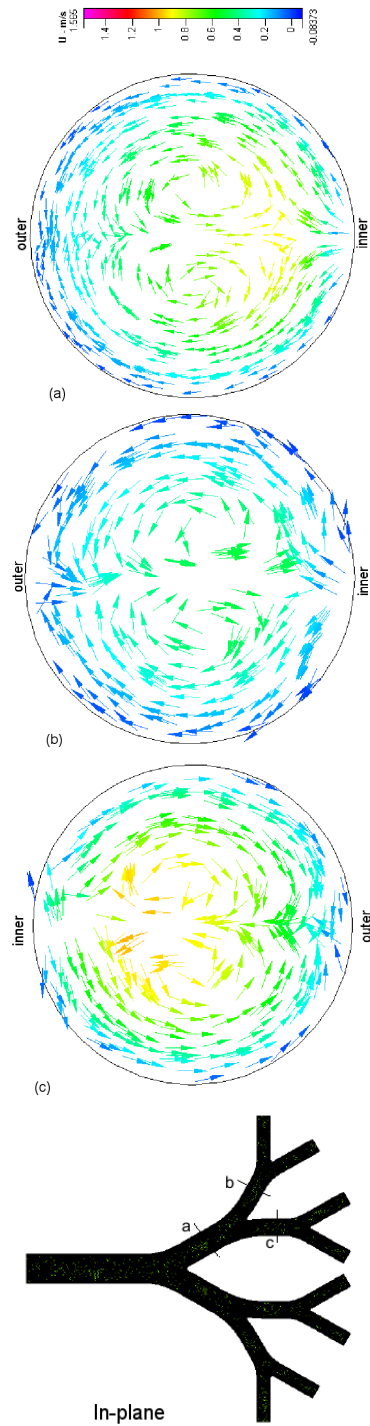


FIGURE 5.23 – Vecteurs flux secondaires : (a) au milieu de $G4$, (b) au milieu de $G5$ externe et (c) au milieu de $G5$ interne (voir (a), (b) et (c) dans le modèle plan en bas).

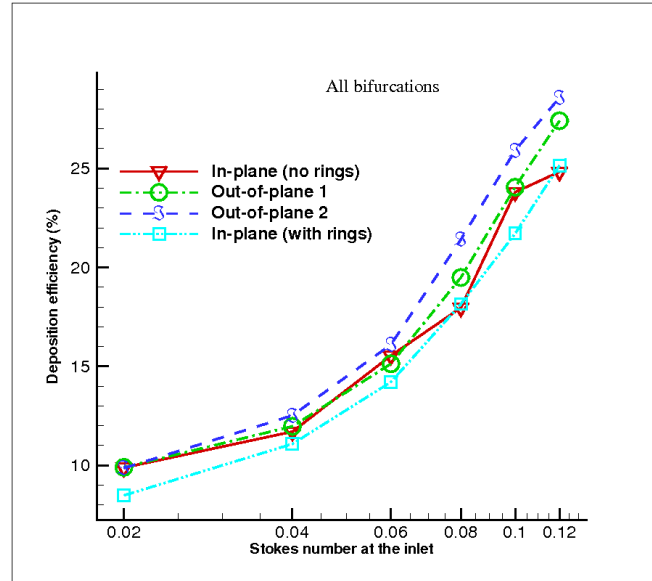


FIGURE 5.24 – Efficacité de dépôt des particules des modèles à triple bifurcation ; sous flux d’inhalation ($Re_{D_{inlet}} = 433$) pour l’ensemble des bifurcations.

fficacités de dépôt (DEs) par rapport au nombre de Stokes pour les différentes bifurcations sont comparées. De toute évidence, les DEs dans la troisième bifurcation sont légèrement plus importantes que dans les premières et secondes bifurcations. Cela signifie que la simulation du DE sur une ou deux bifurcations n’est pas représentatif du dépôt pulmonaire total dans la région donnée $G3-G6$ (Fig. 5.24).

Première bifurcation

Les résultats numériques observés au niveau de cette zone sont similaires pour l’ensemble des modèles étudiés. L’effet d’inertie apparaît ; l’efficacité de dépôt des particules de faible densité est moindre (2 à 3%). Les DEs par rapport au nombre de Stokes à chaque bifurcation sont présentées dans la Fig. 5.25. À signaler que le dépôt des particules dans cette bifurcation reste très faible comparé au dépôt de l’écoulement stationnaire.

Seconde bifurcation

L’efficacité de dépôt des particules reste faible et similaire à la seconde bifurcation de l’étude stationnaire. Pour $0.02 < St \leq 0.08$, le DE représente moins de 3% et aucune différence n’est

visible entre les modèles. Mais pour $0.08 < St \leq 0.12$, l'efficacité de dépôt commence à stagner d'une manière similaire sauf pour la configuration hors-plane 1 où la DE ne cesse d'augmenter. Nous retrouvons la situation déjà rencontrée précédemment. La seule différence majeure avec l'étude précédente est que ici la différence apparaît un peu tardivement ($St = 0.08$).

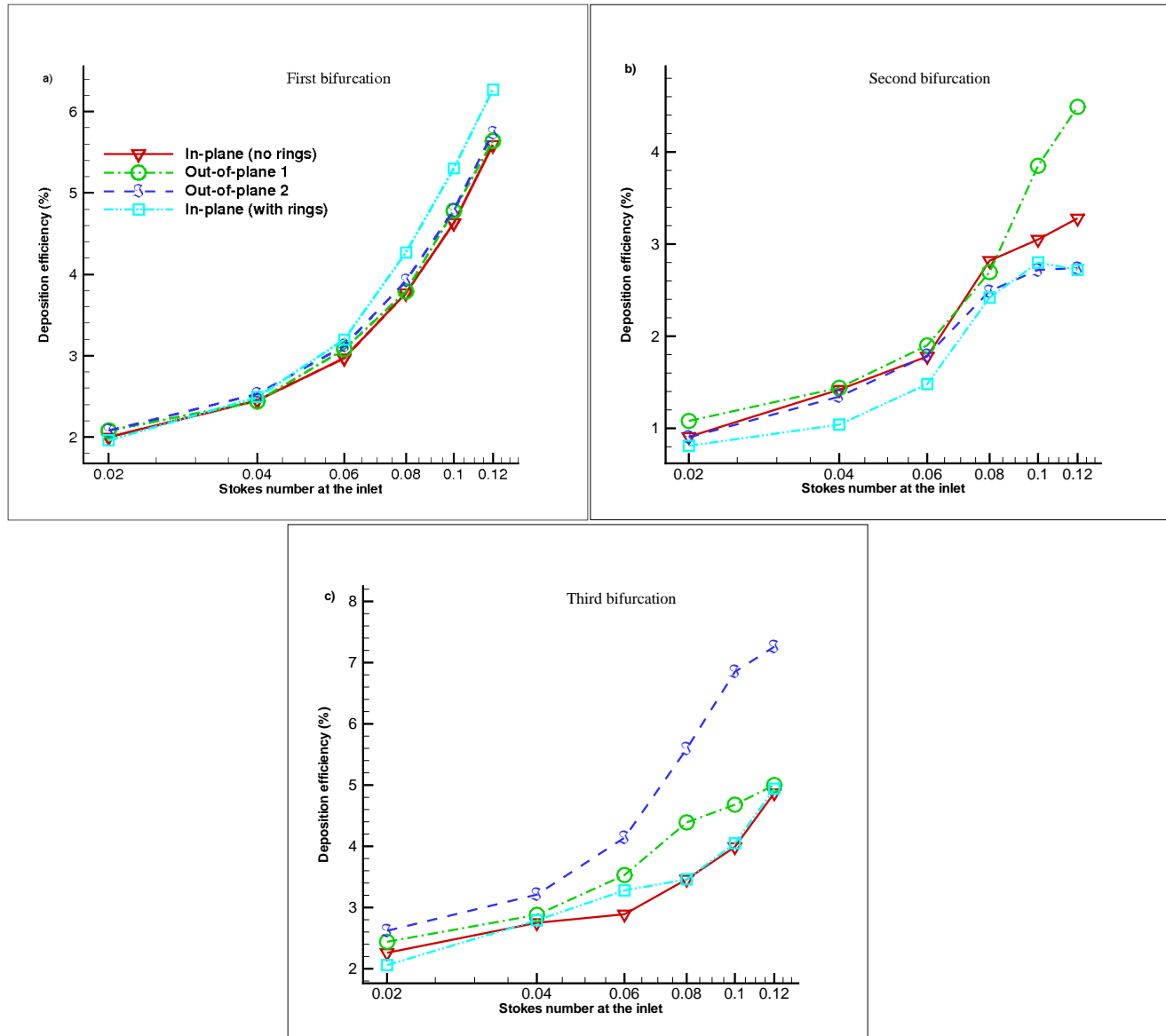


FIGURE 5.25 – Efficacité de dépôt des particules des modèles à triple bifurcation; sous flux d'inhalation ($Re_{D_{inlet}} = 433$); (a) à la première bifurcation, (b) à la seconde bifurcation et (c) à la troisième bifurcation.

Troisième bifurcation

La Fig. 5.25 montre une relation de DE avec St . Le DE croît avec l'augmentation de St pour toutes les configurations. Le DE de la configuration hors-plane 2 est plus élevé à travers la gamme des $0.08 < St \leq 0.12$ testés. Nous remarquons que le plus grand nombre de dépôts a lieu dans cette bifurcation contrairement à l'étude précédente.

La quantité de particules déposées (exprimée en pour cent d'aérosol entrant dans le cylindre-parent pendant une inspiration au repos, c'est-à-dire, DE en fraction % de dépôt) dans chaque bifurcation au cours de laquelle le DE varie avec le nombre de Stokes, est montré dans la Fig. 5.25. Il est intéressant de noter que le DE en dehors de la troisième bifurcation est très faible et peut augmenter à un plus grand nombre de Stokes cas suite au dépôt des particules lourdes au niveau des bifurcations.

2.3 Conclusion

L'étude du cas instationnaire nous a permis de comprendre qu'il est possible de simuler avec le code *CFD-ACE* un débit respiratoire au repos ($14l/min$) qui affecte directement le transport et le dépôt des particules dans les modèles de Weibel. Les résultats suggèrent que le dépôt des particules dans les tubes cylindriques se concentrent principalement par le mécanisme d'inertie, et que l'angle spatial (30°) (voir configurations hors-planes) est un facteur important pour la DE . Le dépôt des particules dans les bifurcations augmente avec la croissance du nombre de St (à noter que St est une fonction directe de la vitesse d'écoulement et donc étroitement liée avec $Re_{D_{inlet}}$). Les résultats montrent également le rôle des écoulements secondaires sur le dépôt des particules dans les bifurcations des conduites cylindriques.

3 Conclusion du chapitre

Les structures de l'écoulement d'air et le transport des particules dans les modèles bronchiques des voies respiratoires au cours des deux inhalations stationnaire et instationnaire ont été simulés, en utilisant le code de calcul commercial *CFD-ACE*. Le logiciel commercial *CFD-GEOM* a été utilisé pour créer les surfaces en 3D de la géométrie des voies aériennes et ainsi

générer le maillage non-structuré tétraédrique en volumes finis. Pour l'analyse présentée dans cette étude, il est supposé que l'écoulement d'air est laminaire, stationnaire (ou instationnaire) et incompressible ; les particules de diamètre $5\mu m$ sont sphériques et sans interaction, la gamme de nombre de Reynolds d'entrée est de $500 \leq Re_{D_{inlet}} \leq 1500$ et la gamme de nombre de Stokes est $0.02 \leq St \leq 0.12$ et la paroi des voies respiratoires est rigide et lisse. Le pourcentage global de dépôt des particules dans les poumons peut s'exprimer comme une efficacité de dépôt et se définit par le rapport entre le nombre de particule déposée dans une région donnée et le nombre total de particule admises initialement dans cette région. L'efficacité de dépôt dépend fortement du nombre de Stokes d'entrée, des conditions d'admission en termes de profil de vitesse du fluide, la distribution des particules, et le nombre de Reynolds d'entrée, ainsi que des caractéristiques des particules. Les principaux résultats obtenus sur l'écoulement d'air et le dépôt des particules dans les modèles de quatre générations $G3 - G6$ en tridimensionnel basés sur le modèle de 23-génération de [Weibel \(1963\)](#) sont résumés comme suit :

L'analyse de l'étude de transport et de dépôt des particules dans un écoulement laminaire et stationnaire nous a permis de conclure que les résultats numériques obtenus sont en très bon accord avec les données expérimentales existant dans la littérature. Un fort effet de l'inertie des particules indique que le dépôt des particules dans les conduites est principalement due à l'impact par inertie aux parois.

La géométrie de configurations et de la vitesse d'entrée de l'écoulement ont un effet significatif sur le dépôt de particules dans les bifurcations. Le dépôt de particules se produit essentiellement au niveau des bifurcations. Enfin, il n'y a pas de différences significatives quant au dépôt des particules dans la structure avec des anneaux de la trachée par rapport au modèle simple sans anneaux trachéaux.

Dans le cas de l'écoulement instationnaire, les résultats obtenus sont similaires à ceux de l'étude stationnaire.

Chapitre 6

Application II : Géométries réalistes

L'imagerie médicale est certainement l'un des domaines de la médecine qui a le plus progressé ces vingt dernières années. Ces récentes découvertes permettent non seulement un meilleur diagnostic mais offrent aussi de nouveaux espoirs de traitement pour de nombreuses maladies (cancer, asthme, etc...). L'identification précise de la lésion facilite déjà le recours à la chirurgie, seule solution thérapeutique pour certains malades. De telles techniques permettent également de mieux comprendre le fonctionnement de certains organes encore mystérieux, comme le cerveau. Les techniques d'imagerie médicale comme le scanner par rayon- X , l'Imagerie par résonance Magnétique nucléaire (IRM) et l'imagerie Ultra-sonore sont aujourd'hui largement utilisées dans le milieu médical. Il existe quelques possibilités pour mesurer le débit et les profils de vitesse : soit par une méthode appropriée IRM, soit par vélocimétrie ultra-sonore Doppler. Dans ce chapitre, nous avons étendu notre étude à de véritables géométries réalistes de rat et de lapin issues de l'imagerie médicale (Service de Biophysique et Médecine Nucléaire du CHU Hautepierre à Strasbourg, Université de Monash, Australie). Nous nous sommes particulièrement intéressés à l'écoulement du fluide et les modes de dépôt des particules dans les poumons..

1 Poumons du rat³

Une fois le solveur et la méthode validés, nous nous sommes rapprochés du Service de Biophysique et Médecine Nucléaire dirigé par le Professeur A. Constantinesco au CHU de Hautepierre à Strasbourg. Ce service dispose à des fins de recherche d'une animalerie et d'un scanner à rayon- X $\mu - CT$ (Fig. 6.1(a)) : un rat sédaté est placé dans la machine où il inhale un agent de contraste qui permet d'obtenir des images ex-vivo de son thorax (Fig. 6.1(b)). Après une étude de post-traitement, ces images permettent de reconstruire un modèle tridimensionnel des poumons de l'animal (Fig. 6.1(c)).

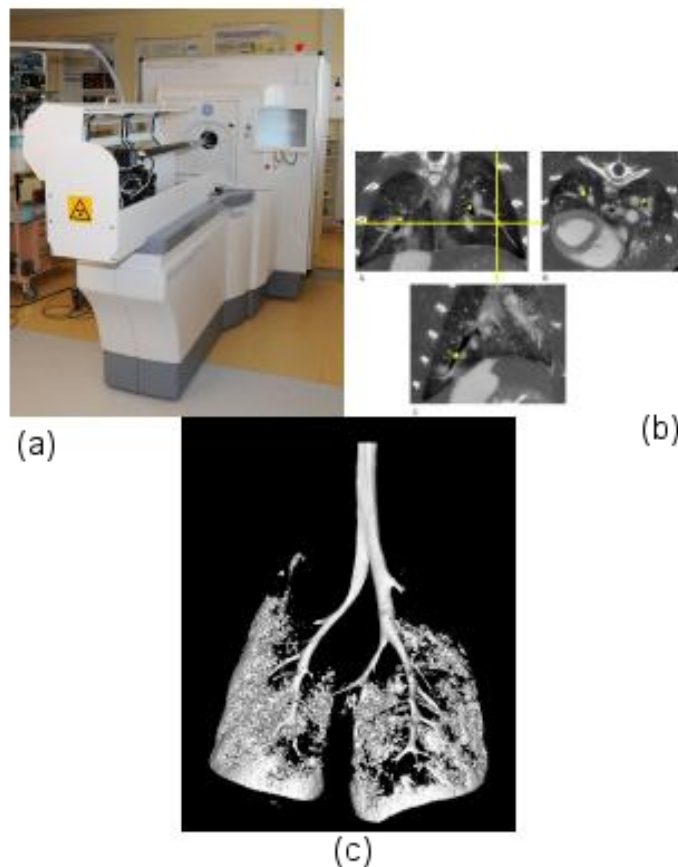


FIGURE 6.1 – (a) Scanner à rayon- X $\mu - CT$ (eXplore Vision 120, GE Healthcare, Waukesha, USA), (b) images issues du scanner et (c) reconstruction 3D des poumons de rat.

3. Goetz, C., Constantinesco, A., Choquet, P. *Service de Biophysique et Médecine Nucléaire*, CHU de Hautepierre, 1 Av. Molière, 67 098 Strasbourg, France.

Cette géométrie tridimensionnelle telle quelle n'est pas encore exploitable car le domaine n'est pas encore fermé et généralement le rendu nécessite un lissage. Il faut de plus éliminer tous les artéfacts de la segmentation (Fig. 6.2(a)) pour ne garder qu'un modèle pulmonaire exploitable (Fig. 6.2(b)). Cette première étape de l'étude est extrêmement fastidieuse et est effectuée avec le logiciel libre *gmsh*.

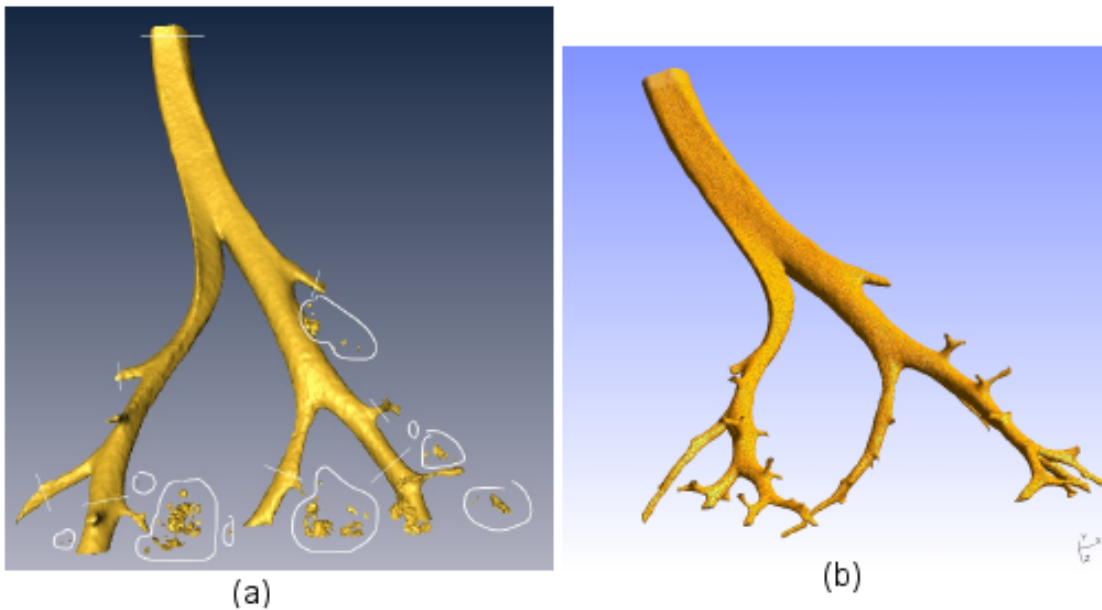


FIGURE 6.2 – (a) Suppression des artéfacts de la segmentation sous *gmsh* pour obtenir la configuration finale (b).

| <i>Données sur la grille 3D</i> | Maillage 1 | Maillage 2 | Maillage 3 | Maillage 4 |
|--|------------|------------|------------|------------|
| Nombre total de noeuds | 63 468 | 124 539 | 245 787 | 889 335 |
| Nombre total de faces triangulaires | 630 945 | 1 278 900 | 2 390 044 | 8 835 561 |
| Nombre total de cellules tétraédriques | 303 821 | 619 997 | 1 145 893 | 4 256 543 |

TABLE 6.1 – Résumé des données sur la grille 3D de plusieurs maillages des poumons de rat.

Cette géométrie est ensuite exportée dans le format de stéréolithographie *STL* (technique de prototypage rapide) pour être lissée, réparée (trous de la géométrie) et maillée avec le *CFD-GEOM*, le mailleur de la suite *CFD-ACE*. Nous avons généré plusieurs maillages (table 6.1)

pour vérifier la convergence en maillage des résultats. La respiration d'un rat de 500g étant de $4ml.s^{-1}$, cela nous donne dans notre configuration une vitesse de $1m.s^{-1}$, soit un nombre de Reynolds de $Re_{D_{inlet}} = 152$ ce qui laisse supposer que l'écoulement reste stationnaire et laminaire. Pour cette configuration et celle du lapin, les mêmes conditions aux limites sont appliquées à savoir une condition d'entrée en vitesse (gradient de pression nul), une condition de paroi et des conditions de sorties (pression imposée uniformément à 0, gradient de vitesse nul). Le fait d'appliquer la même pression sur toutes les sorties n'est pas physique mais il n'est pas encore possible à l'heure actuelle d'obtenir des conditions réelles. Cela fait partie des perspectives sur lesquelles nous travaillerons par la suite.

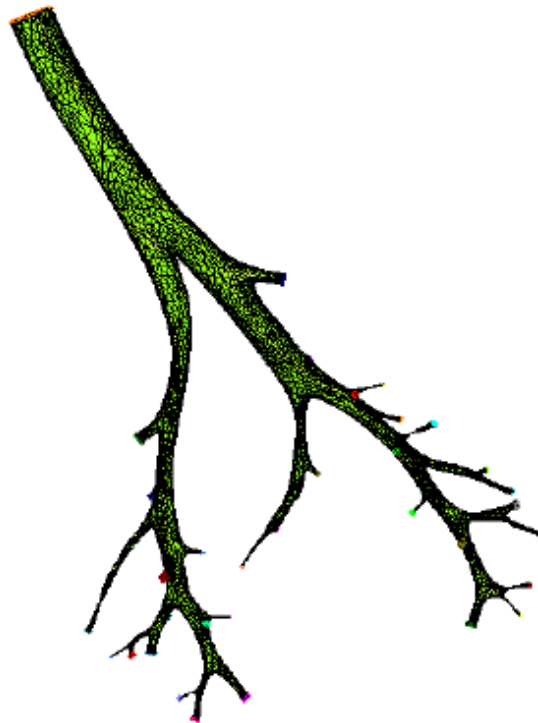


FIGURE 6.3 – Reconstruction poumons de rat - Image CHU Hautepierre - Pr. Constantinesco par Y. Hoarau (IMFS) - Maillage par S. Salmon.

La Fig. 6.4 montre la perte de charge ainsi que l'allure des lignes de courant dans le poumon du rat : l'écoulement est relativement simple et ne semble pas présenter de recirculation au vu de la faible courbure des bifurcations. La difficulté ne réside clairement pas ici dans la simulation

elle même mais plutôt dans la génération d'une géométrie viable et du maillage associé : dans ce cas précis, la géométrie initiale comportait des constriction non-physiques sur plusieurs sorties ce qui rendait la simulation complètement irréaliste même en rallongeant les sorties par des tuyaux. Grâce à une collaboration avec Stéphanie Salmon, Laboratoire de Mathématique de l'Université de Reims, nous avons obtenu une géométrie beaucoup plus lisse avec moins de constriction ce qui facilite la simulation (voir Fig. 6.3).

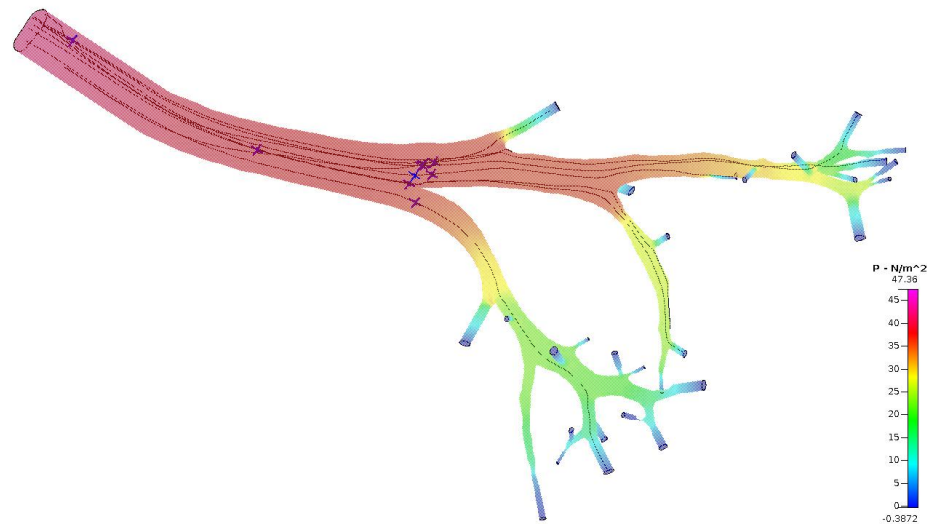


FIGURE 6.4 – Visualisation de la perte de charge et des lignes de courant dans le poumon du rat.

1.1 Vecteurs flux secondaires

La Fig. 6.5 montre les vecteurs vitesses secondaires pour trois positions de différentes sections de la géométrie. Le flux secondaire, qui est induit par la courbure du tube et la division du débit dans les tubes-filles, n'est pas assez fort pour produire un écoulement de type Dean. Toutefois, le flux secondaire est toujours identifiable, et la plupart des flux à haute vitesse se déplace de la paroi interne à la paroi extérieure. Dans cette géométrie réaliste, les modes d'écoulement sont beaucoup plus compliqués que ceux de modèles bronchiques symétriques en raison de leur complexité tridimensionnelle. La longueur de certaines bronches est trop courte pour former l'écoulement de Dean. L'écoulement secondaire dans la bronche de gauche (petite bronche) est

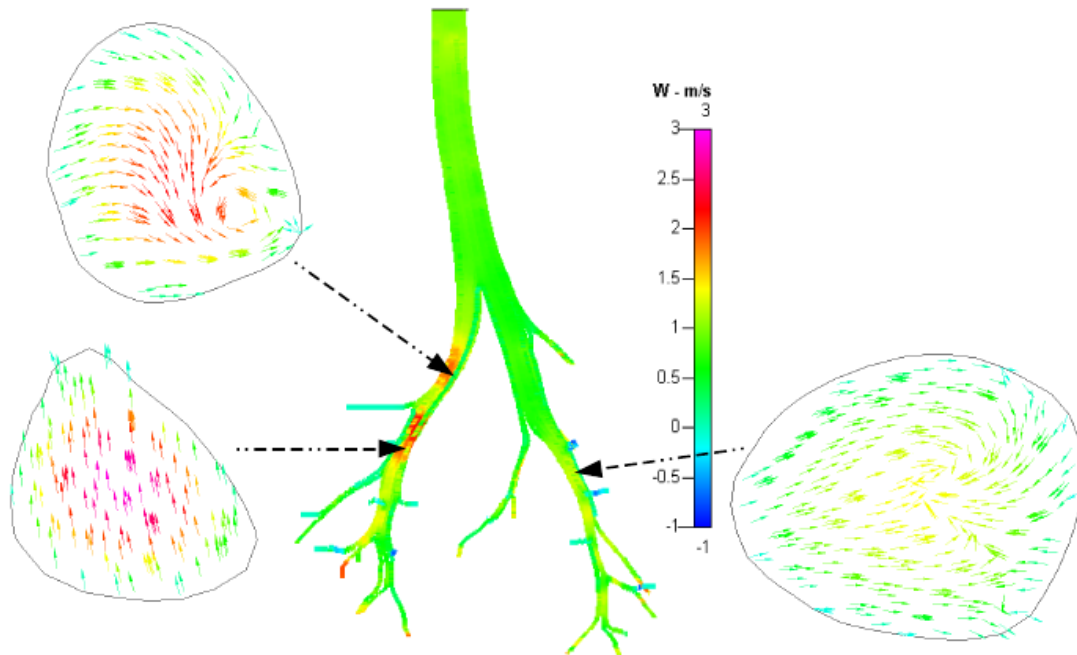


FIGURE 6.5 – Vecteurs flux secondaires.

beaucoup plus forte que celui de la bronche de droite.

1.2 Trajectoires des particules

La Fig. 6.6 montre une vue tridimensionnelle des trajectoires d'un certain nombre de particules transportées dans les voies aériennes. Les particules qui empruntent les trajectoires proche paroi se déplacent lentement en raison de la vitesse faible de l'écoulement à cet endroit. L'existence de certaines zones d'un flux secondaire faible peut modifier notamment ces trajectoires. Les bronches terminales sont plus difficiles à visualiser. Nous avons pour cela représenté quelques vues agrandies en 3D de ces zones (Fig. 6.7). Il ne semble pas y avoir de zones de recirculation du fait de la nature longiligne des poumons du rat.

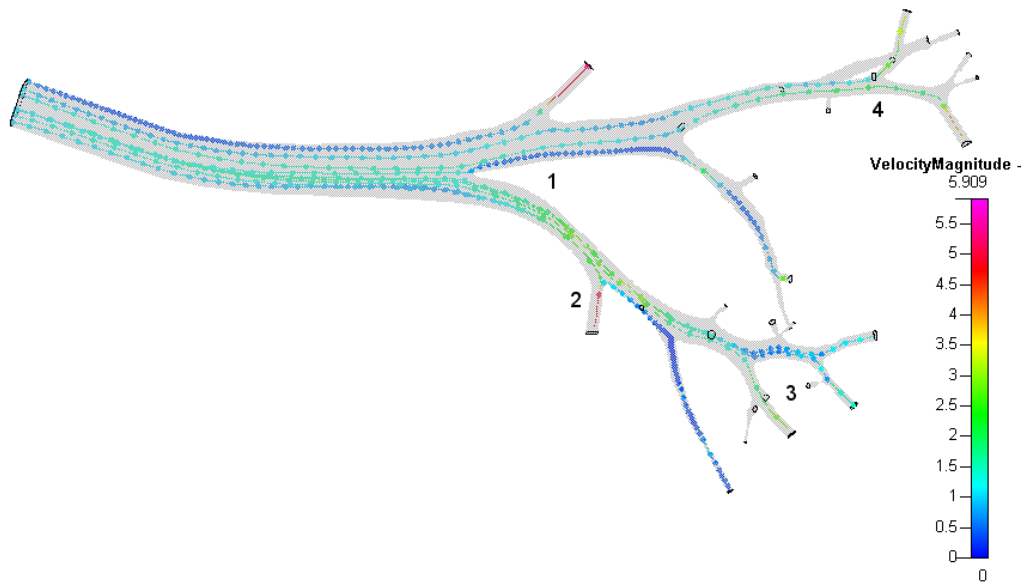


FIGURE 6.6 – Trajectoires des particules transportées.

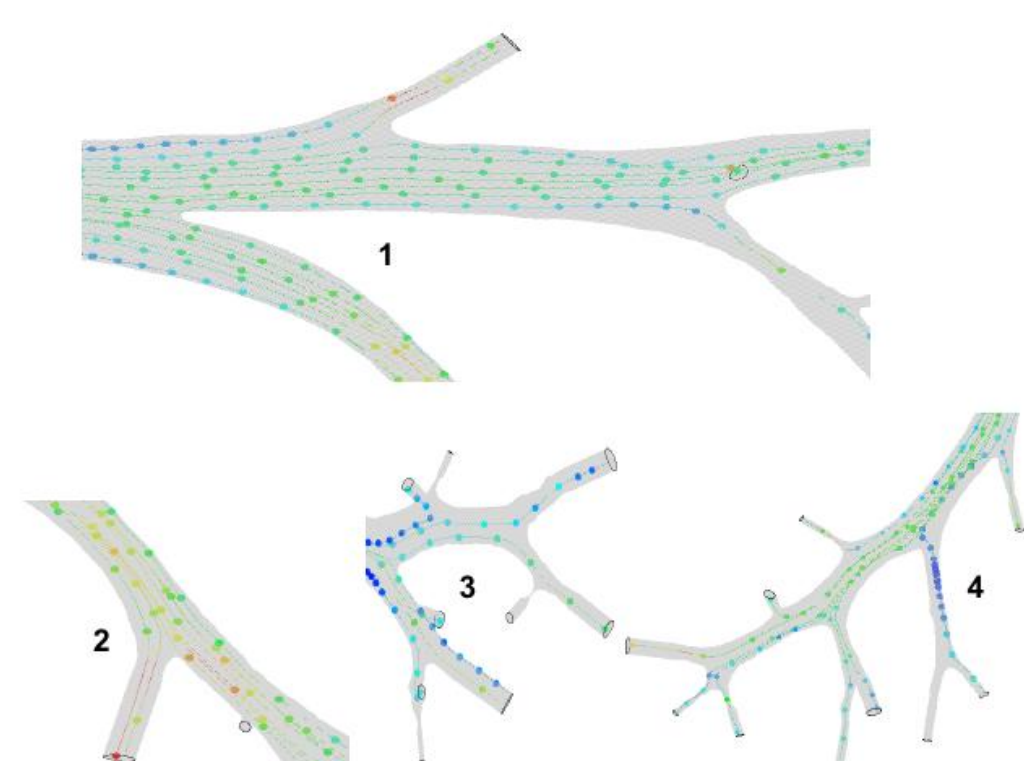


FIGURE 6.7 – Trajectoires des particules dans les parties agrandies.

1.3 Dépôt des particules

La Fig. 6.8 montre le dépôt des particules observé. On constate que le dépôt se fait uniquement au niveau des bifurcations et des courbures ce qui est très compréhensible car la géométrie des poumons du rat est assez linéaire contrairement aux poumons humains et nous avons déjà observé que le mécanisme de dépôt était un mécanisme inertiel. Les résultats numériques concernant le dépôt ont été obtenus avec quatre maillages intermédiaires plus ou moins raffinés et la convergence des résultats est obtenue (Fig. 6.8).

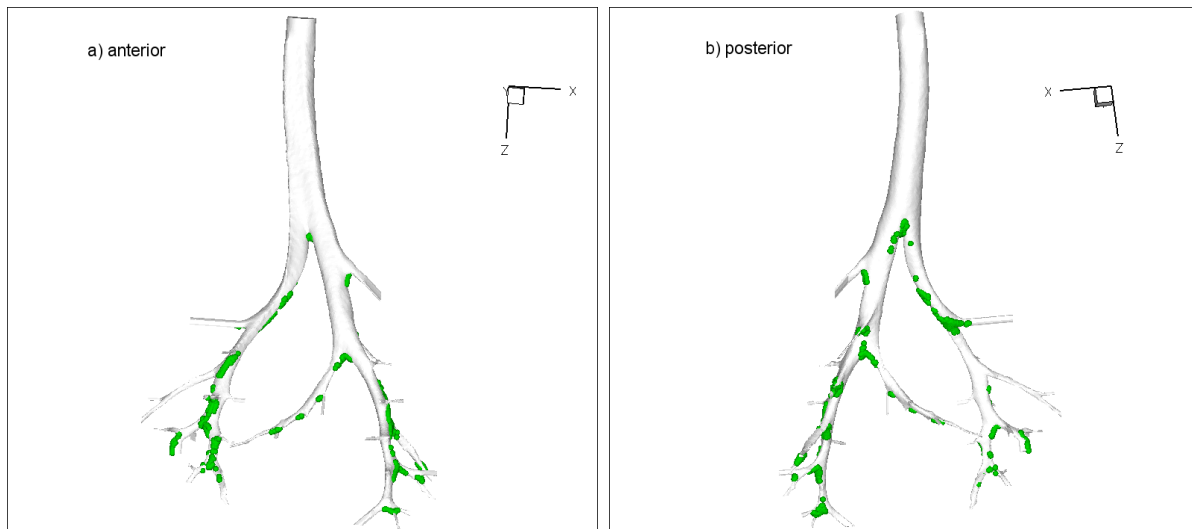


FIGURE 6.8 – Modes de dépôt des particules dans les poumons du rat.

La Fig. 6.8(a) montre une vue d'ensemble de la face antérieure du modèle et la Fig. 6.8(b) illustre la face postérieure. Selon l'étude réalisée sur le modèle bronchique du Weibel, les dépôts de particules se sont produits principalement dans les bifurcations dû essentiellement à l'impaction. Toutefois, dans ce modèle réel, le dépôt des particules n'est pas limité qu'aux bifurcations.

La Fig. 6.9 représente l'efficacité de dépôt des particules (le rapport des particules se déposant sur la surface du domaine et les particules entrant dans le domaine) pour un nombre de Reynolds de $Re_{D_{inlet}} = 152$. La grande différence de dépôt des particules se situe dans la gamme $0.02 \leq St \leq 0.06$, mais au delà de $0.06 \leq St$ les différences restent minimales. Dans la géométrie à maillage raffiné, l'efficacité de dépôt est faible pour des particules à faible densité

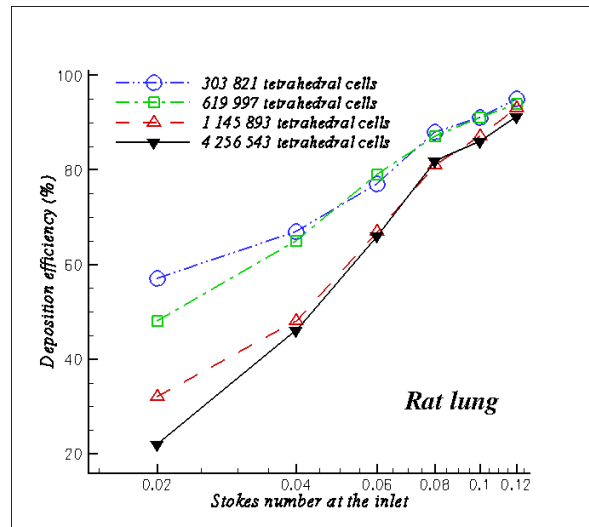


FIGURE 6.9 – Efficacité de dépôt des particules pour $Re_{D_{inlet}} = 152$.

et croît rapidement pour des particules à forte densité. Un maillage conséquent est nécessaire pour obtenir l'indépendance du dépôt vis-à-vis du maillage. Cela est dû encore une fois à un raffinement insuffisant dans la zone pariétale.

2 Poumons de lapin

Lors de son récent séjour à Toulouse (délégation *CNRS* puis *CRCT*), Yannick Hoarau a eu l'occasion de rencontrer Andréas Fouras, chercheur sénior à l'Université de Monash, Australie. Ce chercheur a mis au point une technique de synchronisation entre la respiration forcée d'un lapin intubé et les images 4D (3D + le temps) obtenus par un scanner *CT* à synchrotron qui permet d'avoir une très bonne résolution à la fois spatiale et temporelle. Nous avons pu obtenir une géométrie (Fig. 6.10(a)) et nous avons généré des maillages de 1.2 millions à 4.4 millions de cellules (table 6.2). La vitesse d'entrée a été imposée à $1m.s^{-1}$ soit $Re_{D_{inlet}} = 176$. La Fig. 6.10(b) montre les lignes de courant de l'écoulement où l'on peut noter l'existence d'une zone tourbillonnaire en aval de la zone d'intubation. Les lignes de courants sont assez torturées dans les premières bifurcations ce qui laisse supposer qu'il peut y exister là encore de zones de recirculation. Nous retrouvons ici un comportement similaire à un écoulement en présence de tourbillons de Dean.

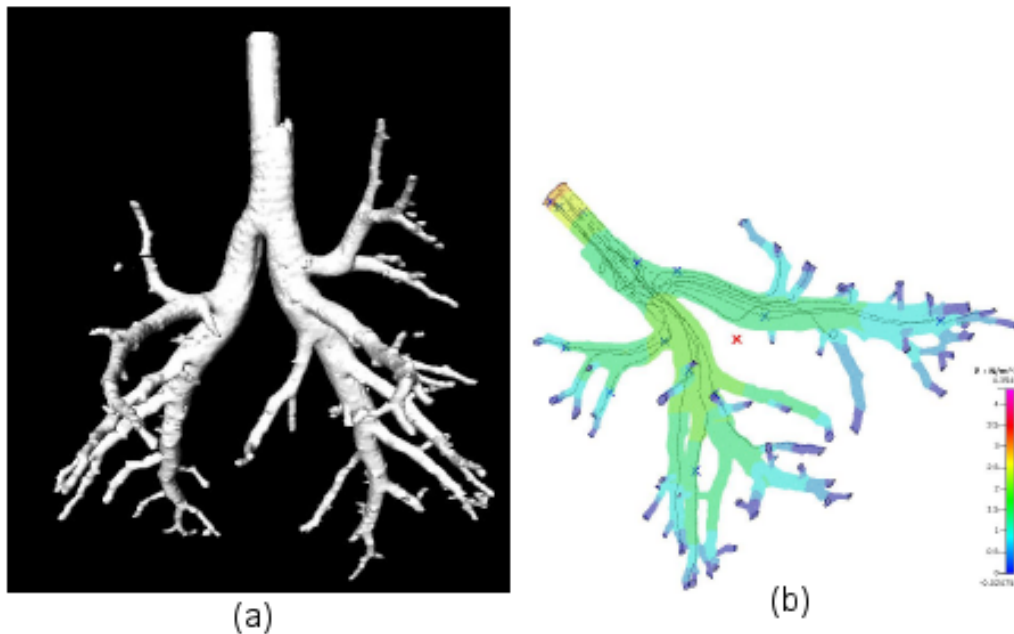


FIGURE 6.10 – (a) Géométrie des poumons de lapin issue de la segmentation, (b) lignes de courant et pertes de charge issues de la simulation sur un maillage à 4.4 millions de cellules.

| <i>Données sur la grille 3D</i> | Maillage 1 | Maillage 2 | Maillage 3 | Maillage 4 |
|--|------------|------------|------------|------------|
| Nombre total de noeuds | 264 614 | 353 979 | 725 069 | 937 905 |
| Nombre total de faces triangulaires | 2 520 986 | 3 395 040 | 7 027 875 | 9 237 043 |
| Nombre total de cellules tétraédriques | 1 202 954 | 1 622 481 | 3 366 760 | 4 439 828 |

TABLE 6.2 – Résumé des données sur la grille 3D de plusieurs maillages des poumons du lapin.

2.1 Vecteurs flux secondaires

Les résultats des flux secondaires calculés uniquement en aval de la zone d'intubation dans la conduite principale (la trachée), en raison de la complexité de la géométrie, sont montrés dans la figure 6.11 pour illustrer leurs comportements en deux positions bien distinctes dans la voie aérienne. L'écoulement de Dean étudié auparavant dans les conduites des modèles bronchiques est clairement identifié dans la Fig. 6.11(a). L'écoulement observé engendre deux tourbillons contra-rotatifs qui sont similaires à ceux de tubes cintrés (Dean, 1927, 1928). Ce phénomène de recirculation est causé par les profils de vitesses faussés proche paroi de la conduite. La vitesse de l'écoulement reste généralement nulle à la proche paroi et augmente en fur et à mesure que l'intensité du flux se concentre et s'équilibre vers une zone proche du centre de la conduite. Dans la figure 6.11(b) un seul tourbillon est encore visible en raison de déséquilibre de l'écoulement. Par contre, aucune recirculation n'est observée à l'entrée de la première bifurcation et au-delà.

2.2 Trajectoires et dépôt des particules

Pour illustrer la forte dépendance entre le dépôt des particules ($Re_{D_{inlet}} = 176$, $0.02 \leq St \leq 0.12$ et $d_p = 5\mu m$) par impaction inertielle dans les voies aériennes et l'effet de la vorticit  de l'écoulement, un total de 11 000 particules sph riques sont simul es dans les poumons du lapin. Les trajectoires de quelques particules puls es sont repr sent es dans la Fig. 6.12, d montrant ainsi d'une mani re g n rale la grande difficult    suivre correctement les trajectoires de chaque particule dispers e en raison de la complexit  de la pr sente g om trie tridimensionnelle et du maillage   cellules t tra driques non structur es. L'existence d'un flux secondaire affectant les

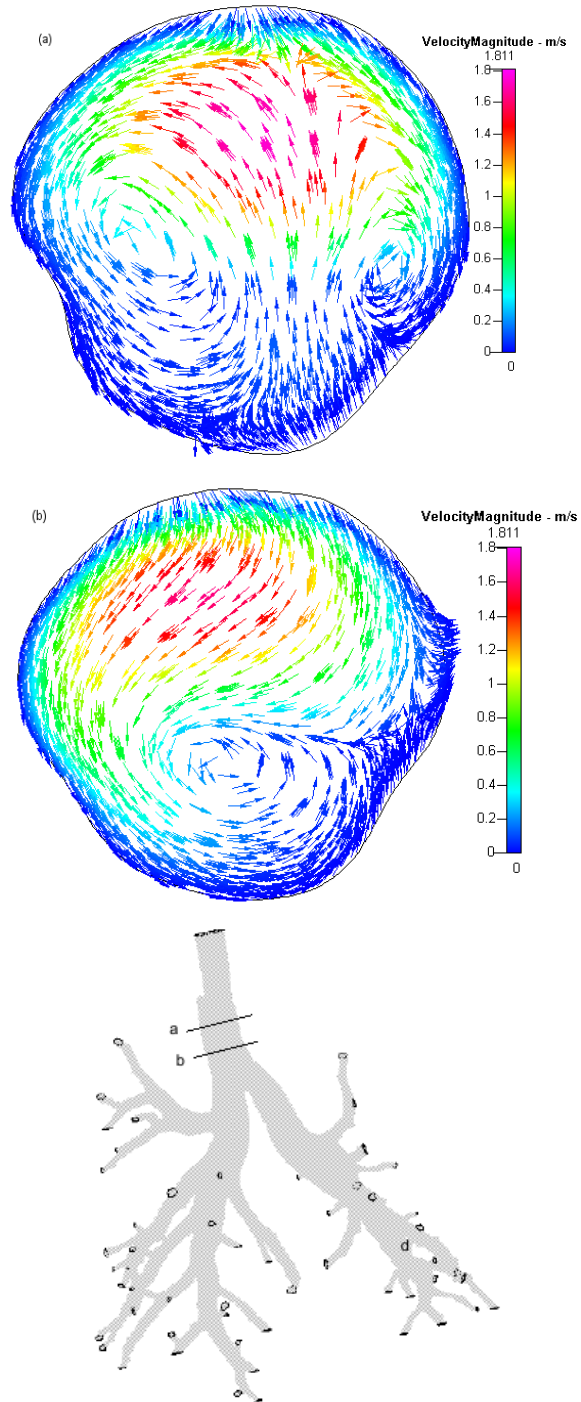


FIGURE 6.11 – Vecteurs flux secondaires (voir les positions (a) et (b) des coupes de sections dans la configuration du poumon du lapin).

trajectoires des particules est seulement visible dans la branche principale. La situation reste confuse dans certaines régions plus profondes et l'intensité du flux secondaire est très faible.

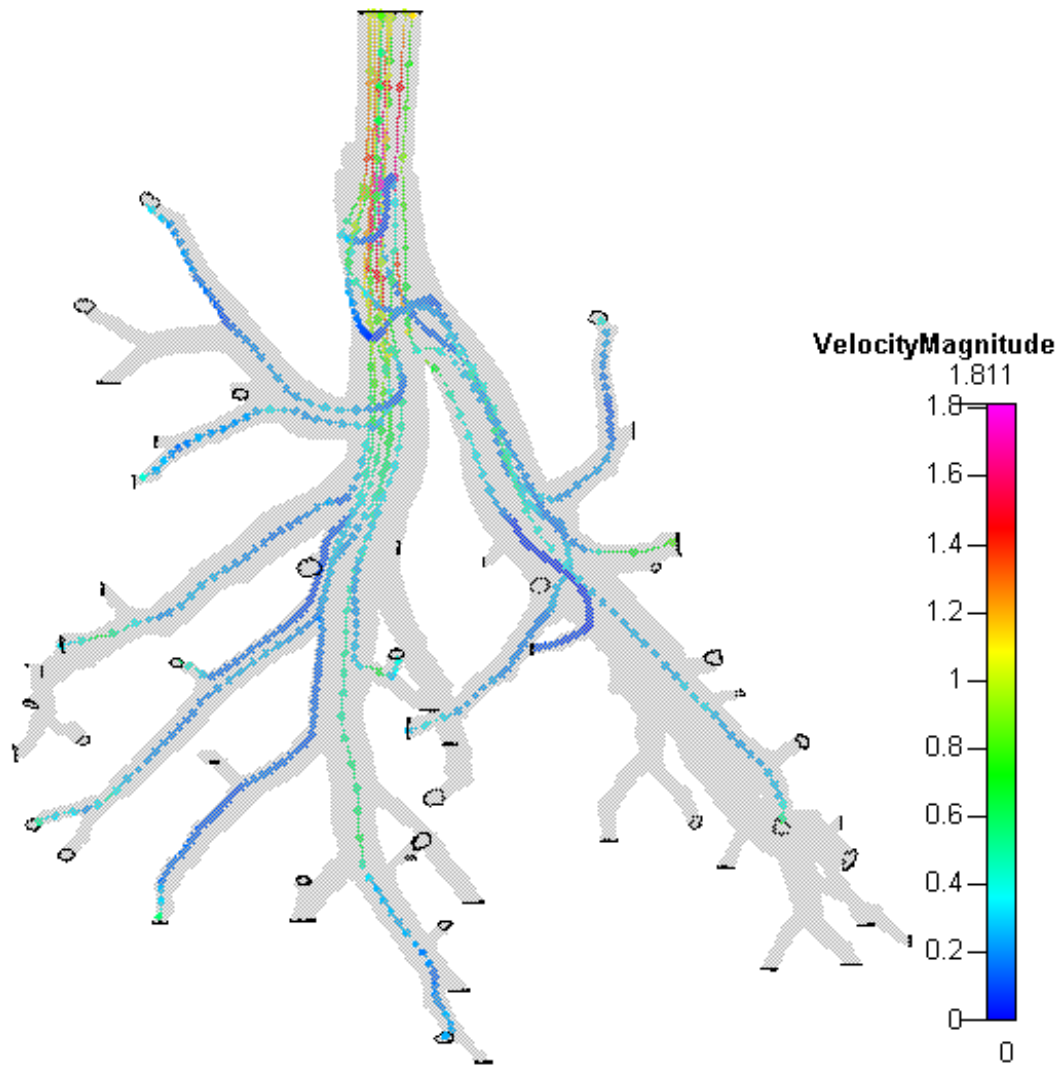


FIGURE 6.12 – Trajectoires de quelques particules pour $Re_{D_{inlet}} = 176$.

La figure 6.13 montre les comportements des trajectoires de 11 particules injectées initialement de façon aléatoire. Les trajectoires de ces particules indiquent clairement la forte influence des zones de recirculation observée particulièrement au niveau proche de la zone d'intubation de la conduite principale.

En ce qui concerne le dépôt des particules, les calculs obtenus pour la convergence en maillage

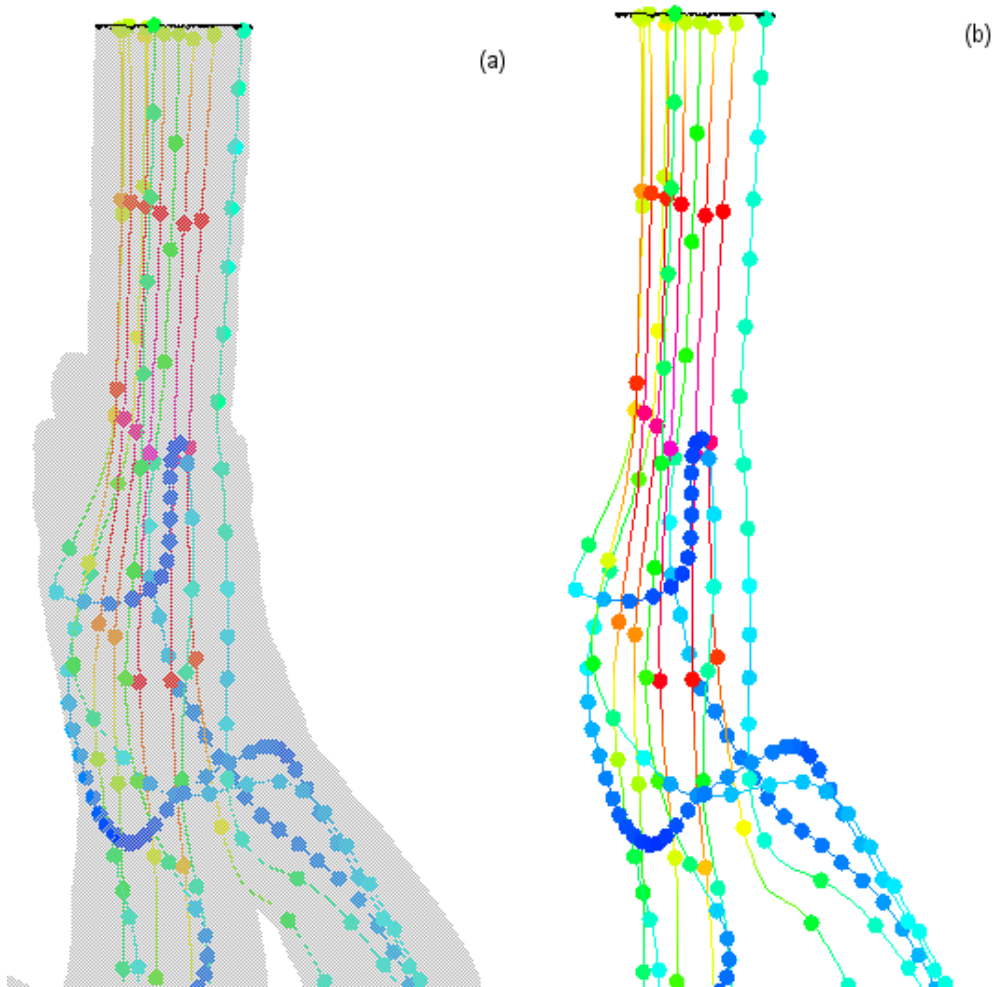


FIGURE 6.13 – Zoom sur les comportements des trajectoires des particules dans la zone proche d'intubation : (a) en présence de la paroi et (b) sans la paroi.

sont présentés dans la Fig. 6.15. Selon l'étude réalisée sur le modèle bronchique, le dépôt des particules se produit principalement dans les bifurcations suite essentiellement à l'impact inertiel. Toutefois, dans cette configuration réaliste, le dépôt n'est pas non plus limité qu'aux bifurcations. Les anneaux cartilagineux dans la trachée et les grosses bronches provoquent une répartition de dépôt sur les deux faces. Apparemment, il y a beaucoup plus de particules déposées dans la face antérieure que dans la face postérieure, indiquant une influence significative des anneaux cartilagineux sur le dépôt des particules. Le dépôt est ici assez différent de celui observé dans les poumons du rat : on retrouve ici un dépôt aux bifurcations mais aussi à divers autres endroits. Cela s'explique par la présence des tourbillons de Dean ainsi que par leur

convection du tourbillon en aval de l'intubation.

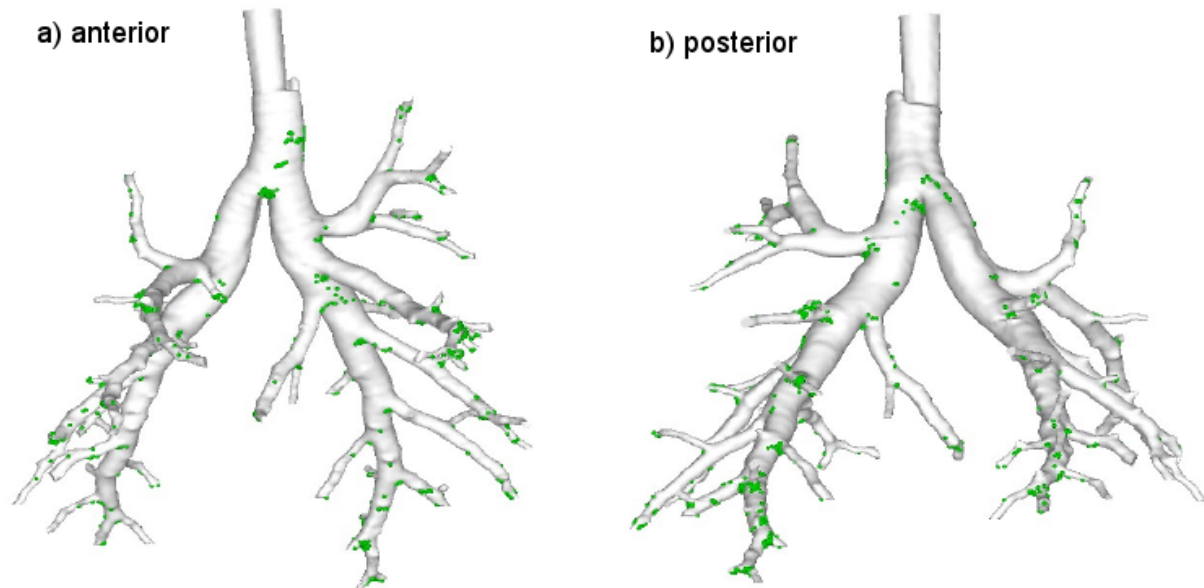


FIGURE 6.14 – Modes de dépôt des particules dans les poumons du lapin pour $Re_{D_{inlet}} = 176$.

2.3 Efficacité de dépôt des particules

La Fig. 6.15 montre la comparaison des efficacités de dépôt des particules (DEs) de quatre types de géométries à maillages différents. D'une manière générale, le dépôt croît de façon similaire pour toutes les configurations avec l'augmentation de la densité des particules (ρ_p). Toutefois, le dépôt reste faible dans la configuration à maillage raffiné et est considérable dans la configuration à maillage grossier. Néanmoins, plus le maillage est raffiné et moins le dépôt des particules dans les géométries varie dans toute la gamme de nombre de Stokes d'entrée ($0.02 \leq St \leq 0.12$). En terme d'efficacité de dépôt, les mêmes remarques qu'à l'étude des modèles bronchiques s'imposent.

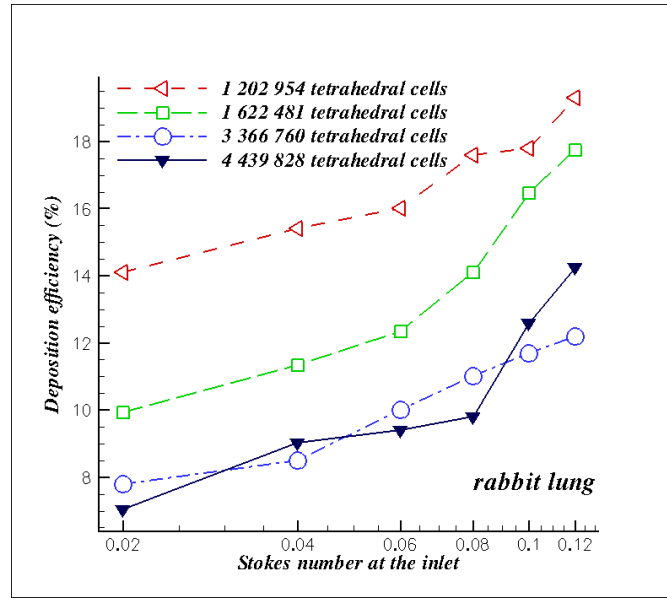


FIGURE 6.15 – Efficacité de dépôt des particules dans les poumons du lapin pour $Re_{D_{inlet}} = 176$.

3 Conclusion du chapitre

Nous avons modélisé avec succès les écoulements ainsi que le transport et le dépôt de particules dans des configurations réalistes (poumons de rat et de lapin). On constate que la simulation, bien que coûteuse (surtout pour le dépôt des particules), ne présente pas de difficultés insurmontables. Par contre l'obtention d'une géométrie saine et la génération du maillage associé peut être une étape clé pour une modélisation fiable.

Chapitre 7

Conclusions et perspectives

1 Conclusion générale

L'étude engagée dans cette thèse consiste à mettre en place une modélisation numérique fiable et complète de l'écoulement, du transport et du dépôt des particules dans les voies aériennes pulmonaires en se basant sur l'utilisation du code de calcul commercial *CFD-ACE*. Ce code intègre un solveur fluide qui résout les équations de Navier-Stokes incompressibles dans une formulation volumes finis. Le logiciel commercial *CFD-GEOM* a été utilisé pour créer les surfaces tridimensionnelles de la géométrie des voies aériennes et ainsi générer le maillage non-structuré tétraédrique en volumes finis. Dans le cadre de ce travail, il est supposé que l'écoulement d'air est laminaire, stationnaire ou instationnaire et incompressible ; les particules de diamètre $5\mu m$ sont sphériques et sans interaction. Le pourcentage global et local du dépôt des particules dans les poumons peut s'exprimer comme une efficacité de dépôt et se définit par le rapport entre le nombre de particules déposées dans une région donnée et le nombre total de particules admises initialement à l'entrée de la conduite. L'efficacité de dépôt dépend fortement du nombre de Stokes d'entrée ($0.02 \leq St \leq 0.12$), des conditions d'admission en termes de profil de vitesse du fluide (nombre de Reynolds d'entrée), de la distribution et des caractéristiques des particules.

Les principaux résultats de cette recherche peuvent être décrits comme suit :

1.1 Application I

L'écoulement dans la phase d'inspiration et le dépôt des particules dans des modèles de quatre générations $G3 - G6$ en $3D$ basés sur le modèle de 23-génération de [Weibel \(1963\)](#) ont été étudiés numériquement. Les simulations ont été effectuées pour trois nombres de Reynolds d'entrée différents ($Re_{D_{inlet}} = 500$, $Re_{D_{inlet}}=1000$ et $Re_{D_{inlet}}=1000$). Le bon accord entre les simulations numériques et les mesures expérimentales montre que le code *CFD-ACE* est suffisamment précis pour simuler un écoulement d'air réel et le dépôt des particules dans les voies aériennes humaines.

Le type d'écoulement observé, dans les configurations **plane** et **hors-plane** 1 au niveau de la génération $G4$, montre la formation d'une paire de tourbillons contrarotatifs, qui sont semblables à ceux observés dans les tubes cintrés de Dean (pour les deux modèles). Pour le modèle plan, deux tourbillons contrarotatifs sont encore visibles au milieu de la branche de $G5$ interne. Toutefois, l'écoulement secondaire est beaucoup plus faible dans la branche externe que dans la branche interne de $G5$. Comparé aux tourbillons à la branche de la génération $G4$, le sens de rotation du tourbillon change en raison de la courbure de la branche. Pour le modèle hors-plan 1, dans la bifurcation symétrique $G5$ les deux tourbillons contrarotatifs se divisent avec un tourbillon dans une branche et l'autre tourbillon dans une autre branche. Par conséquent après cette bifurcation l'écoulement est caractérisé par un unique tourbillon dominant. Les tourbillons observés sont déformés du même côté.

Les mouvements des particules dans une section donnée de la bifurcation sont directement liés aux écoulements secondaires correspondant dans ou en amont de cette section. A faible nombre de Reynolds, la force de l'écoulement tourbillonnaire est faible de sorte que les particules peuvent généralement suivre l'écoulement d'air axial dans un large intervalle de nombre de Stokes ($0.02 \leq St \leq 0.12$). Avec l'augmentation du nombre de Reynolds, l'intensité de l'écoulement secondaire peut générer une zone dense de dépôt des particules, avec une concentration élevée de particules le long de cette région. Avec l'augmentation de nombre de Stokes, l'efficacité de dépôt des particules croît considérablement. Dans le cas stationnaire, il a été constaté que le dépôt des particules se produit principalement dans la première bifurcation du cylindre-

parent. Les modes locaux de dépôt des particules ne sont significativement dépendant ni de la distribution des particules d'entrée, ni de la position de libération. Le maillage tétraédrique non-structuré ne permet pas non plus de suivre correctement les trajectoires des particules dans les conduites cylindriques dans la région proche paroi par manque de raffinement.

Dans les bifurcations la plupart des particules impacte la paroi à cause de leur inertie et les particules sont concentrées symétriquement le long des bifurcations, très peu de dépôt se forme le long de la paroi hors-bifurcation. Cependant, le mode de dépôt des particules présente une symétrie dans les bifurcations à cause du flux réparti de manière symétrique. Un plus grand nombre des particules se dépose au niveau de la seconde bifurcation et une région de forte concentration en particules existe dans le centre de la bifurcation en aval de $G3$. Le dépôt varie considérablement à la deuxième bifurcation entre une configuration planaire et non-planaire. Le dépôt des particules dans les tubes cylindriques s'explique principalement par le mécanisme d'inertie. L'angle spatial (30°) (voir configurations hors-planes) est un facteur important en terme d'efficacité de dépôt. L'augmentation du dépôt dans les bifurcations des cylindres-filles à la sortie de $G5$ est attribuée au fort écoulement secondaire composé d'une paire de tourbillons hélicoïdaux observé dès l'amont de la seconde bifurcation.

L'efficacité du dépôt est fortement influencée par le nombre de Reynolds d'entrée. La relation entre les positions des particules libérées à l'entrée du cylindre-parent et le dépôt des particules sur des endroits spécifiques du poumon dépendent de la complexité de la géométrie et de l'amplitude de la vitesse de l'écoulement. La géométrie joue un rôle important sur l'efficacité de dépôt puisque le taux de dépôt des particules dans la configuration hors-plan 1 au niveau de la seconde bifurcation est significativement plus élevée par rapport aux autres configurations.

La prise en compte des anneaux trachéaux ou cartilagineux dans le cylindre-parent du tube n'a pas conduit à une différence significative dans le dépôt de particules comparé à la configuration plane sans anneaux trachéaux.

Nous avons donc démontré que nous étions capable de générer des maillages dans une géométrie pulmonaire et de simuler correctement l'écoulement stationnaire ou instationnaire, le transport et le dépôt de particules. Cette première étape de validation étant complétée, nous

nous sommes tournés vers le milieu médical pour avoir des configurations réelles et apporter ainsi notre contribution à la compréhension des phénomènes physiques dans des problématiques réelles.

1.2 Application II

Deux géométries réelles de poumons de rat et de lapin issues de l'imagerie médicale ont été étudiées. Nous avons donc vu au cours de ce chapitre l'influence que pouvait avoir le maillage tétraédrique sous *CFD-ACE* dans les géométries réalistes. En raison de la complexité de la géométrie, les modes d'écoulements dans les bronches sont très complexes. En effet, pour une même modélisation d'écoulement d'air ($Re_{D_{inlet}}$ constant), la précision des résultats varie beaucoup selon le choix du maillage. Nous avons pu observer la faisabilité de la simulation dans les configurations réalistes fournies par l'imagerie médicale, bien que la phase de préparation de la géométrie et la phase de maillage soient très complexes. La simulation nous a permis d'affirmer que le dépôt des particules a lieu en général dans les bifurcations. Une différence assez nette entre maillage s'observe pour les particules de petites tailles. Le seul bémol à signaler dans la configuration de poumons du lapin est qu'il existe une recirculation observée au niveau de la trachée, ce qui conduit à un dépôt "anormal" à ce niveau de la conduite.

Nous avons donc été capable de mailler (bien qu'avec des difficultés) et de simuler des géométries réelles. Les écoulements sont bien sûr beaucoup plus complexes que dans les géométries génériques.

2 Perspectives

Le progrès de développement des codes multi-physiques de simulations numériques permet d'envisager des situations de plus en plus complexes. Les techniques de simulations numériques d'écoulements complexes et d'interaction fluide-structure ont atteint un niveau de maturité et de performance telle que l'on peut maintenant s'intéresser à des problèmes multi-physiques complexes. Les simulations donnent accès à un niveau de détail et de phénomènes qu'il est

impossible de reproduire à l'heure actuelle par des méthodes *in vivo* ou *in vitro*. Une simulation du système des voies aériennes du poumon, qui a pour objectif d'approfondir la connaissance du système, doit prendre en compte de nombreux éléments qui n'ont pas jusqu'à lors trouvé leur place dans les simulations en biomécanique tels que les effets des écoulements sur les structures pulmonaires comme les glandes muqueuses, les agents de production des pneumocytes (en y incluant les anomalies), les réactions inflammatoires et anomalies de croissance des poumons. À l'inverse, le développement de la modélisation "inverse", à partir de laquelle des conditions structurelles et fonctionnelles ou des anomalies (qui ne sont pas facilement observables ou mesurable) pourrait être déterminées, aurait un impact important d'un point de vue clinique.

Il existe de nombreuses pistes intéressantes pour continuer la recherche dans ce domaine d'étude. Quelques-unes des pistes les plus prometteuses, organisées par thèmes sont énumérées ci-après :

- (a) Ce travail de thèse a fait ressortir une difficulté majeure qui consiste à générer le maillage. Pour avoir un bon maillage il faut trouver le meilleur adapté et apprendre à le maîtriser. Si l'on s'intéresse à des géométries mobiles pour suivre les déformations engendrées par la respiration la qualité du maillage est encore plus problématique. Une solution envisageable serait de se tourner vers la technique des frontières immergées (Immersed Boundary Methods) où la géométrie est superposée à un maillage cartésien (Fig. 7.1) et imposée à l'écoulement via des termes de forçages. Ainsi il est beaucoup plus facile de déformer la géométrie car le maillage reste fixe. Une étude a été lancée dans l'équipe Instabilités turbulence, diphasique (ITD) de l'IMFS pour écrire un solveur non-structuré, cartésien, massivement parallèle et basé sur la méthode IBM. De plus ce solveur intègrera un raffinement de maillage automatique afin que le maillage s'adapte automatiquement à l'écoulement et à la géométrie. Ce solveur ne nécessitera donc plus de maillage initial car il s'adaptera tout seul à la configuration et facilitera ainsi toutes les études en biomécanique.
- (b) Une autre voie possible concerne la simulation des voies aériennes en tenant compte des mouvements imposés par la respiration. Expérimentalement, l'Université de Monash a déjà été capable d'obtenir plusieurs géométries avec une bonne précision (due à l'utilisation d'un synchrotron) au cours d'un cycle. Néanmoins les géométries obtenues sont toutes

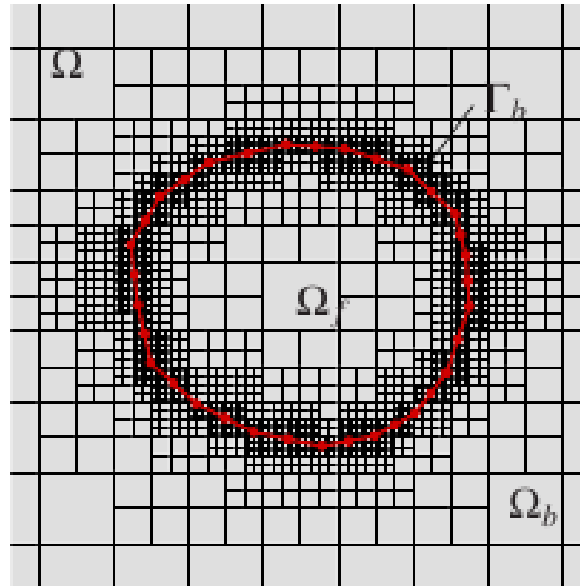


FIGURE 7.1 – Principe de la méthode IBM : maillage numérique raffiné $\Omega = \Omega_b + \Omega_f$; maillage de surface immergé Γ_b ; région non-fluide Ω_b et région fluide Ω_f (Hylla et al., 2011).

décorrélées et pour pouvoir simuler ces mouvements il faut les relier topologiquement en temps.

- (c) L'étude des interactions fluide-structure, prenant en compte les équations de la mécanique des fluides ainsi celle des solides, pour comprendre le comportement de l'endothélie par exemple.
- (d) On peut aussi s'intéresser à la modélisation de la partie haute des voies aériennes (nez, bouche, gorge) où il faudra prendre en compte les effets de la turbulence.
- (e) Reformuler les conditions aux limites sur les pressions statiques aux sorties (pression dynamique, modèle 1D) pour avoir des conditions instationnaires plus physiques.

Concrètement nous avons démontré dans cette thèse un savoir faire numérique pour la modélisation de l'écoulement et du transport de particules dans des voies aériennes et nous sommes maintenant capables d'assister et d'aider des chercheurs du domaine médical à comprendre la physique des écoulements biomécaniques auxquels ils peuvent être confrontés, une compréhension qui pourra, nous l'espérons, aider à la prise de décision clinique.

Bibliographie

- Abadie, M. (2000). Contribution à l'étude de la pollution particulaire : rôle des parois, rôle de la ventilation. Université de La Rochelle. PhD thesis.
- Broday, D. M. & Agnon, Y. (2007). Asymmetric human lung morphology induce particle deposition variation. *Journal of Aerosol Science*.
- Cheng, Y. S., Zhou, Y. & Chen, B. T. (1999). Particle deposition in a cast of human oral airways.. *Aerosol Science and Technology* **31**, 286–300.
- Clift, R., Grace, J. R. & Weber, M. E. (1978). Bubbles, drops, and particles. *Academic Press, New York*.
- Comer, J. K., Kleinstreuer, C. & Kim, C. S. (2001). Flow structures and particle deposition patterns in double-bifurcation airway models. part 2. aerosol transport and deposition. *Journal of Fluid Mechanics* **435**, 55–80.
- Comer, J. K., Kleinstreuer, C. & Zhang, Z. (2001). Flow structures and particle deposition patterns in double-bifurcation airway models. part 1. air flow fields. *Journal of Fluid Mechanics* **435**, 25–54.
- Crowe, C., Sommerfeld, M. & Tsuji, Y. (1998). Multiphase flows with droplets and particle. *CRC Press, USA*.
- Dennis, J. H. (2003). Modelling flow in the airways.. *Mayneord-Phillips Summer School, Oxford University, Oxford UK July 8*.

- Duclaux, V. (2006). Occlusions pulmonaires, Entropion oculaire et Anévrismes : une approche physique en physiologie. Université de Provence. PhD thesis.
- Dunbar, C. A. & Hickey, A. J. (2001). Design of aerosol systems for drug delivery to the lungs using numerical methods. *Medical applications of computer modelling : the respiratory systems WIT press Southampton*.
- Dénes Bejat, T. (2007). Contribution expérimentale et numérique à l'étude du dépôt des particules fines dans les cavités ventilés. Université de La Rochelle. PhD thesis.
- El Akoury, R. (2007). Analyse physique des effets de rotation de paroi en écoulements transitionnels et modélisation d'écoulements turbulents autour de structure portante. Institut National polytechnique de Toulouse. PhD thesis.
- Ethier, C. R. & Simmons, C. A. (2007). Introductory biomechanics : From cells to organisms. *Cambridge University Press*.
- Felici, M., Filoche, M. & Sapoval, B. (2005). Renormalized random walk study of oxygen absorption in the human lung. *Statistical Mechanics and its Applications*, **357(1)**, 27–35.
- Gerrity, R. G. & Herbert, K. N. (1979). Unusual resistance of the ground squirrel to the development of dietary-induced hypercholesterolemia and atherosclerosis. *Experimental and Molecular Pathology* **31**, 452–467.
- Grotberg, J. B. (1994). Pulmonary flow and transport phenomena. *Annual Review of Fluid* **26**, 529–571.
- Guha, A. (2008). Transport and deposition of particles in turbulent and laminar flow. *Annual Review of Fluid Mechanics* **40**, 311–341.
- Hammersley, J. & Olson, D. E. (1992). Physical models of the smaller pulmonary airways. *J. Appl. Physio.*
- Hegedus, J., Balashazy, I. & Farkas, A. (2004). Detailed mathematical description of the geometry of airway bifurcations. *J. Appl. Physio.*

- Hervé-Bazin, B. (2007). Les nanoparticules un enjeu majeur pour la santé au travail. *Institut National de Recherche et de Sécurité (inrs)*.
- Hinds, W. C. (1982). Properties, behavior, and measurement of airborne particles. *Aerosol technology : John Wiley and Sons, New York*.
- Hinds, W. C. (1999). Properties, behavior, and measurement of airborne particles. part 2. aerosol transport and deposition. *Aerosol technology : Second ed., Wiley and Sons*.
- Hoarau, Y., Braza, M. & Ventikos, Y. (2007). Instability and transition analysis in flows with compliant walls : The case of stenosis in blood flows. *2nd symposium on Biomechanics in Cardiovascular Disease : Shear Stress in Vascular Biology, Rotterdam, April 19th and 20th*.
- Horsfield, K. & Cumming, G. (1968). Morphology of the bronchial tree in man. *J. Appl. Physio.*
- Horsfield, K., Dart, G. & Olson, D. E. (1971). Models of the human bronchial tree. *J. Appl. Physio.*
- Hylla, E., Frederich, O. & Thiele, F. (2011). Flow in natural and dynamic airway geometries. *Berlin University of Technology* pp. 1–6.
- Inthavonga, K., Tua, J., Yea, Y., Dinga, S., Subica, A. & Thienb, F. (2010). Effects of airway obstruction induced by asthma attack on particle deposition. *Journal of Aerosol Science* pp. 1–15.
- Jayaraju, S. T. (2009). Study of the Air Flow and Aerosol Transport in the Human Upper Airway using LES and DES Methodologies. PhD thesis.
- Katz, I. M., Schroeter, J. D. & Martonen, T. B. (2001). Factors affecting the deposition of aerosolized insulin. *Diabetes Technology and Therapeutics* **3**, 387–397.
- Kaye, S. R. & Phillips, C. G. (1997). The influence of the branching pattern of the conducting airways on flow and aerosol deposition parameters in the human, dog, rat and hamster. *Journal of Aerosol Science* **28**, 1291–1300.

- Keith Walters, D. & William, H. L. (2010). A method for three-dimensional navier–stokes simulations of large-scale regions of the human lung airway. *Journal of Fluids Engineering* **132**, 1–8.
- Keith Walters, D. & William, H. L. (2011). Computational fluid dynamics simulations of particle deposition in large-scale, multigenerational lung models. *Journal of Biomechanical Engineering* **133**, 1–8.
- Kim, C. S. & Fisher, D. M. (1999). Deposition characteristics of aerosol particles in sequentially bifurcating airway models. *Aerosol Science and Technology* **31**, 198–220.
- Kim, J. I., Syn, C. K. & Morris, J. W. (1983). Microstructural sources of toughness in qlt-treated 5.5ni cryogenic steel. *Metallurgical and Materials Transactions A* **14**, 93–103.
- Kleinstreuer, C. & Zhang, Z. (2003). Laminar-to-turbulent fluid-particle flows in a human airway model. *International Journal Of Multiphase Flow* **29**, 271–289.
- Kleinstreuer, C. & Zhang, Z. (2010). Airflow and particle transport in the human respiratory system. *Annual Review of Fluid Mechanics* **42**, 301–334.
- Li, Z., Kleinstreuer, C. & Zhang, Z. (2007a). Particle deposition in the human tracheobronchial airways due to transient inspiratory flow patterns. *Journal of Aerosol Science* **38**, 625–644.
- Li, Z., Kleinstreuer, C. & Zhang, Z. (2007b). Simulation of airflow fields and microparticle deposition in realistic human lung airway models. part 1 : Airflow patterns. *European Journal of Mechanics B/Fluids* **26**, 632–649.
- Li, Z., Kleinstreuer, C. & Zhang, Z. (2007c). Simulation of airflow fields and microparticle deposition in realistic human lung airway models. part 2 : Particle transport and deposition. *European Journal of Mechanics B/Fluids* **26**, 650–668.
- Liu, Y., So, R. M. C. & Zhang, C. H. (2002). Modeling the bifurcating flow in a human lung airway. *Journal of Biomechanics* **35**, 465–473.
- Longest, P. W. & Holbrook, L. T. (2011). In silico models of aerosol delivery to the respiratory tract – development and applications. *Advanced Drug Delivery Reviews* p. 1–67.

- Luo, X. Y., Hinton, J. S., Liew, T. T. & K., T. K. (2004). Les modelling of flow in a simple airway model. *Medical Engineering and Physics*.
- Maury, B. (2004). Hydrodynamique dans le poumon, relations entre flux et géométries. PhD thesis.
- Moussa, A. (2009). Etude mathématique et numérique du transport d'aérosols dans le poumon humain. Ecole Normale Supérieur de Cachan. PhD thesis.
- Nowak, N., Kakade, P. P. & Annapragada, A. V. (2003). Computational fluid dynamics simulation of airflow and aerosol deposition in human lungs. *Annals of Biomedical Engineering*.
- Petroff, A. (2005). Etude mécaniste du dépôt sec d'aérosols sur les couverts végétaux. Université d'Aix-marseille II. PhD thesis.
- Sera, T., Fujioka, H., Yokota, H., Makinouchi, A., Himeno, R., Schroter, R. & Tanishita, K. (2003). Three-dimensional visualization and morphometry of small airways from microfocal x-ray computed tomography. *Journal of Biomechanics*.
- Sosnowski, T. R., Moskal, A. & Gradon, L. (2006). Dynamics of oropharyngeal aerosol transport and deposition with the realistic flow pattern. *Inhalation Toxicology* **18**, 773–780.
- Sosnowski, T. R., Moskal, A. & Gradon, L. (2007). Mechanisms of aerosol particle deposition in the oro-pharynx under non-steady airflow. *Annals of Occupational Hygiene* **51**, 19–25.
- Soualah-Alila, A. (2008). Modélisation mathématique et numérique du poumon humain. PhD thesis. Thèse de doctorat de l'Université Paris-Sud XI.
- Taylor, D. M. (1996). Human respiratory tract model for radiological protection. *Journal of Radiological Protection*.
- Tian, G. & Worth Longest, P. (2010). Development of a cfd boundary condition to model transient vapor absorption in the respiratory airways. *Journal of Biomechanical Engineering* **132**, 1–13.

- Tian, G., Longest, P. W. & Hindle, T. (2011). Characterization of respiratory drug delivery with enhanced condensational growth (ecg) using an individual path model of the entire tracheobronchial airways. *Annals of Biomedical Engineering* **39**, 1136–1153.
- Weibel, E. R. (1963). Morphometry of the human lung. *New York, Academic Press*.
- Weibel, E. R. (1984). The pathway for oxygen, structure and function in the mammalian respiratory system. *Harvard University Press*.
- Widdicombe, J. H. (2002). Regulation of the depth and composition of airway surface liquid. *Journal of Anatomy* **201**, 313–318.
- Witschger, O. & Fabriès, J. F. (2005). Particules ultra-fines et santé au travail. 1- caractéristiques et effets potentiels sur la santé. *INRS, Département Métrologie des polluants, Second trimestre* pp. 21–35.
- Wolfgang, A. W. & Rabczuk, T. (2008). Fluid–structure interaction in lower airways of ct-based lung geometries. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* **57**, 653–675.
- Yang, X. L., Liu, Y., So, R. M. C. & Yang, J. M. (2006). The effect of inlet velocity profile on the bifurcation copd airway flow. *Computers in Biology and Medicine* **36**, 181–194.
- Yang, X. L., Luo, H. Y. & Liu, Y. (2006). Respiratory flow in obstructed airways. *Journal of Biomechanics* **39**, 2743–2751.
- Yang, X. L., Luo, H. Y. & Liu, Y. (2007). Particle deposition in obstructed airways. *Journal of Biomechanics* **40**, 3096–3104.
- Zhang, C. H., Liu, Y., So, R. M. C. & Phan-Thien, N. (2002). The influence of inlet velocity profile on three-dimensional three-generation bifurcating flows. *Computational Mechanics* **29**, 422–429.
- Zhang, H. & Papadakis, G. (2010). Computational analysis of flow structure and particle deposition in a single asthmatic human airway bifurcation. *Journal of Biomechanics* **43**, 2453–2459.

- Zhang, Y. & Finaly, W. H. (2005). Measurement of the effect of cartilaginous rings on particle deposition in a proximal lung bifurcation model. *Aerosol Sciences and Technology* **39**, 394–399.
- Zhang, Z. & Kleinstreuer, C. (2003). Species heat and mass transfer in a human upper airway model. *International Journal of Heat and Mass Transfer* **46**, 4755–4768.
- Zhang, Z., Kleinstreuer, C. & Kim, C. S. (2002). Aerosol deposition efficiencies and upstream release position for different inhalation modes in an upper bronchial airway model. *Aerosol Sciences and Technology* **36**, 828–844.
- Zhang, Z., Kleinstreuer, C., Donohue, J. F. & Kim, C. S. (2005). Comparison of micro- and nano-size particle depositions in a human upper airway model. *Journal of Aerosol Science* **36**, 211–233.
- Zhao, Y. & Lieber, B. B. (1994). Steady inspiratory flow in a model symmetric bifurcation. *Trans. ASME : J. Biomech. Engrg.* **116**, 488–496.

Annexe A

Annexe

Transport de particules dans un modèle de Weibel

H. ILMI ROBLEH, Y. HOARAU, J. DUŠEK

Institut Mécanique des Fluides et Solides - UDS - CNRS
2, rue Boussingault, 67 000 Strasbourg

Résumé :

Notre étude s'intéresse à la modélisation numérique des écoulements pulmonaires en se basant sur l'utilisation du code de calcul commercial CFD-ACE. Ce code intègre un solveur fluide qui résout les équations de Navier-Stokes incompressibles dans une formulation volume fini, et un solveur solide basé sur une discrétisation par éléments finis. L'objectif de cette étude consiste donc à proposer une modélisation numérique fiable et complète du transport de particules dans un écoulement pulmonaire en prenant en compte les mouvements imposés par la respiration.

En pratique deux types de configurations symétriques, des voies aériennes supérieures humaine à triple bifurcation et à paroi rigide, sont considérées : un modèle plan (avec et sans anneaux trachéaux) et deux modèles hors-plan (sans anneaux trachéaux). Cette géométrie correspond au modèle de Weibel, de la 3^{ème} à la 6^{ème} génération de bifurcations. Les données du modèle de base sont données par Comer, Zhang, Kleinstreuer et Kim dans leurs diverses publications.

Cette première étude se concentre sur la simulation du transport et du dépôt des particules pour des écoulements stationnaires et instationnaires (travail en cours) sans mouvements de paroi. Seul les résultats stationnaires sont présentés dans cet article.

L'efficacité de dépôt est corrélée avec les nombres de Stokes ($0.02 \leq St \leq 0.12$) et de Reynolds ($Re = 500$, $Re = 1000$ et $Re = 1500$). La géométrie joue un rôle important sur l'efficacité de dépôt puisque le taux de dépôt des particules dans la configuration hors-plan (deg 1) reste nettement supérieur au dépôt dans les configurations planaires.

D'autre part le dépôt des particules se concentre sur les bifurcations géométriques et il diminue à chaque bifurcation. Enfin, il n'y a pas de différences significatives quant au dépôt des particules de la structure présentant des anneaux trachéaux comparée au modèle plan simple.

Par la suite, nous nous intéresserons à l'étude des écoulements instationnaires lors d'un cycle respiratoire avant de prendre en compte le mouvement de la structure.

Abstract :

Our study focuses on numerical modeling of the flow in the lungs based on the use of the commercial computer code CFD-ACE. This code includes a fluid solver that solves the incompressible Navier-Stokes equations in a finite volume formulation and a structural solver based on a finite element discretization. The objective of this study is to propose a reliable and complete numerical model of transport of particles in the pulmonary flow by taking into account the movement imposed by breathing. In practice two types of configurations of a symmetrical triple junctions in the human upper airways with rigid walls are considered : a plane model (with and without tracheal rings) and two off-plane models without tracheal rings. This geometry corresponds to the model of Weibel, from the 3rd to the 6th generation of junctions. The basic model data are given by Comer, Zhang, Kleinstreuer and Kim in their various publications. The first study focuses on the simulation of the transport and deposition of particles in steady and unsteady flows (work in progress) without wall movements. Only steady results are presented in this paper.

The efficiency of the deposition is correlated with the Stokes ($0.02 \leq St \leq 0.12$) and Reynolds ($Re = 500$, $Re = 1000$ and $Re = 1500$) numbers. The geometry plays an important role since the efficiency of particles deposition in the off-plane configuration (deg 1) remains less significantly higher than the deposit in the planar configurations.

On the other hand the deposit of particles decreases at each bifurcation. Finally, there are no significant differences in the particles deposition in the structure with tracheal rings compared with the simple plane model.

Thereafter, we will study the case of unsteady flows in a breathing cycle before taking into account the movement of the structure.

Mots clefs : simulation numérique, transport de particules, modèle pulmonaire de Weibel

1 Introduction

Les particules d'aérosols présentes dans notre environnement sont de plus en plus identifiées comme étant des facteurs de risque pour la santé, mais les aérosols peuvent également être utilisés à des fins de diagnostic ou en-

core thérapeutiques pour soigner les affections pulmonaires. En particulier, les petites particules qui atteignent les surfaces d'échange gazeux dans la région alvéolaire des poumons sont considérées comme les plus néfastes pour la santé. Les inhalateurs, par exemple, sont couramment utilisés pour administrer des médicaments [1]. Dans les cas d'affections pulmonaires, l'administration de médicament par aérosol présente l'avantage d'atteindre directement la région affectée et le traitement nécessite ainsi des doses inférieures (les effets secondaires sont donc minimisés).

Le poumon humain est une succession de bifurcations à deux branches. Il possède en moyenne 23 générations de bifurcations, soit environ 17 millions de bifurcations. Les 5 dernières générations sont couvertes de structures alvéolaires au travers desquelles a lieu l'échange gazeux avec le sang [2].

Pour cette étude, deux types de configurations symétriques, à paroi rigide, ont été construites pour représenter un modèle des voies aériennes : un modèle plan (avec et sans anneaux trachéaux) et deux modèles hors-plan sans anneaux trachéaux. La géométrie correspond donc à un modèle de Weibel de la 3^{ème} à la 6^{ème} génération. Le dépôt des particules a lieu, en général, sous l'action de trois mécanismes :

- l'impact par inertie : ce mode de dépôt dépend du diamètre et de la vitesse des particules. Celles dont la taille est supérieure à $10 \mu m$ impactent au niveau de l'oropharynx tandis que les plus petites se faufilent profondément dans l'arbre bronchique.
- la sédimentation résulte de l'effet de la pesanteur qui fait descendre les particules vers la paroi bronchique. Elle influence surtout les petites particules (1 à $5 \mu m$) et ne concerne que les bronches et les alvéoles. Elle est maximale pour un faible débit aérien et on peut la favoriser par une simple pause respiratoire en fin d'inspiration.
- la diffusion ou le mouvement brownien est due à l'agitation désordonnée des petites particules (taille inférieure à $0.5 \mu m$) qui subissent des chocs avec les molécules gazeuses. Ce mode de dépôt est insignifiant puisque 80% des particules restent alors en suspension et sont éliminées lors de l'expiration [3].

2 Modélisation numérique

2.1 La géométrie des voies aériennes

Les configurations considérées ont des parois rigides, elles sont symétriques, planaire (1 modèle) et hors-plan (2 modèles). Ces géométries correspondent au modèle de Weibel (1963) [4] de la 3^{ème} à la 6^{ème} génération (voir figure 1). Elles sont identiques aux modèles utilisés par Kim et Fisher (1999) dans leurs études expérimentales. Les géométries sont représentées sur la figure 1 et détaillées dans le tableau 1. Les dimensions des anneaux trachéaux ont été obtenus par Zhang et Finaly [5]. Il y a 20 cycles de sections semi-lisse avec un diamètre de $0.1D_1$ (figure non représentée dans ce papier) [6]. Ces géométries sont maillées dans CFD-GEOM en non-structuré. La taille du maillage, pour toutes les configurations plane et hors-plan, varie de 366000 à 393600 cellules respectivement. Une étude de convergence en maillage a été effectuée.

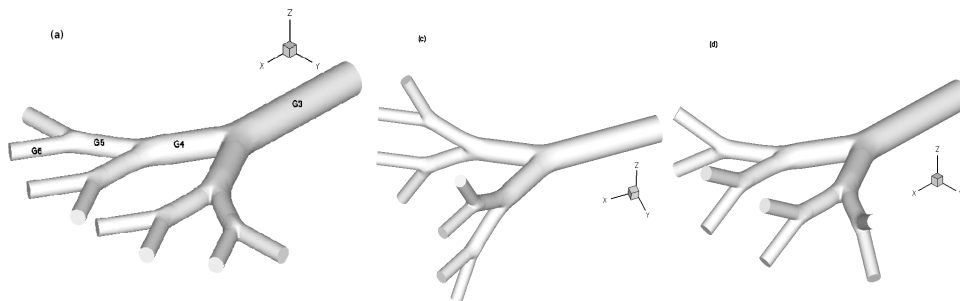


FIG. 1 – Modèles sans anneaux trachéaux de l'arbre bronchique : (a) modèle plan ; (b) modèle hors-plan (deg 1) et (c) modèle hors-plan (deg 2).

2.2 Loi de transport des particules

Les équations de transport fluide-particule en coordonnées cartésiennes pour un écoulement d'air laminaire, stationnaire et incompressible sont données comme suit :

Continuité :

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (1)$$

Quantité de mouvement :

$$(\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nabla \cdot [\nu (\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^{tr})] \quad (2)$$

où \vec{v} est la vitesse du fluide, ρ est la masse volumique (densité) du fluide, p est la pression et ν est la viscosité cinématique du fluide [7], [8].

Equation de la trajectoire de la particule :

L'équation de la trajectoire de la particule est obtenue à partir de l'équation fondamentale de la dynamique dans laquelle on néglige les forces dues aux mouvements Brownien (particules relativement grosses), les forces de pression et de gravité (les particules sont beaucoup plus denses que l'air) et la portance due à l'effet Magnus (faible rotation des particules). Cette équation s'écrit donc :

$$m_p \frac{d^2 \vec{x}_p}{dt^2} = C_{DP} \frac{\pi d_p^2}{4} \rho \frac{(\vec{v} - \vec{v}_p) |\vec{v} - \vec{v}_p|}{2} \quad (3)$$

où m_p est la masse de la particule, \vec{x}_p est le déplacement de la particule, d_p et \vec{v}_p sont le diamètre et la vitesse de la particule, respectivement, et C_{DP} est le coefficient de traînée donné par (Clift et Al., 1978) :

$$C_{DP} = \frac{C_D}{C_{slip}} \quad (4)$$

où

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} & \text{pour } 0 < Re_p \leq 1 \\ \frac{24}{Re_p^{0.646}} & \text{pour } 1 < Re_p \leq 400 \end{cases} \quad (5)$$

Le nombre de Reynolds de la particule locale a pour expression :

$$Re_p = \frac{\rho d_p |\vec{v} - \vec{v}_p|}{\mu} \quad (6)$$

où μ est la viscosité dynamique du fluide. Une corrélation pour le facteur de correction de Cunningham, C_{slip} , peut être trouvée dans Clift et Al., (1978) [6], [9], [10]. La gamme représentative des nombres de Stokes [6] étudiés et les valeurs des paramètres numériques sont données dans le tableau 2.

Ces équations sont résolues dans le package commercial CFD-ACE sur un maillage non-structuré avec une discrétisation centrée.

| Bifurcation | Première | Seconde | Troisième |
|--|------------------------------|-----------------------|-----------------------|
| Diamètre du cylindre-parent | $D_1 = 0.6$ | $D_2 = 0.5$ | $D_3 = 0.35$ |
| Diamètre de la gaine du cylindre-fille | $D_2 = 0.5$ | $D_3 = 0.35$ | $D_4 = 0.29$ |
| Rayon de courbure de la bifurcation | $R_{b1} = 2.7D_2$ | $R_{b2} = 4.7D_3$ | $R_{b3} = 2.7D_4$ |
| Rayon de courbure carinal | $r_{c1} = 0.1D_2$ | $r_{c2} = 0.1D_3$ | $r_{c3} = 0.1D_4$ |
| Longueur des gaines | $L_1 = 2.4$ $L_2 = 0.836$ | $L_3 = 0.437$ | $L_4 = 0.928$ |
| Demi-angle de la bifurcation | $\theta_1 = 30^\circ$ | $\theta_2 = 30^\circ$ | $\theta_3 = 30^\circ$ |

TAB. 1 – Paramètres géométriques pour les modèles à triple-bifurcation (toutes les dimensions sont en cm) [7], [9].

| | | | |
|--|------------------|-------------------|-------------------|
| Nombre de Reynolds | $Re_{D_1} = 500$ | $Re_{D_1} = 1000$ | $Re_{D_1} = 1500$ |
| Gamme du nombre de Stokes | | | |
| $St_{D_1} = \frac{\rho_p d_p^2 Re_{D_1}}{\rho D^2 18}$ | 0.02-0.12 | 0.02-0.12 | 0.02-0.12 |
| Diamètre de la particule, $d_p (\mu m)$ | 5 | 5 | 5 |
| Densité de la particule, $\rho (kg m^{-3})$ | 1204-7224 | 602-3612 | 401-2408 |

TAB. 2 – Paramètres numériques.

L'injection annulaire des particules inhalées (spray) est effectuée dans le tube d'admission en définissant préalablement dans CFD-ACE la position et le nombre de flux circonférentiel des particules, ainsi que leur masse volumique et leur diamètre (voir table 2, pour les densités et le diamètre). La vitesse moyenne de l'écoulement du fluide à l'entrée du tube cylindrique est déterminée pour chaque nombre de Reynolds donné.

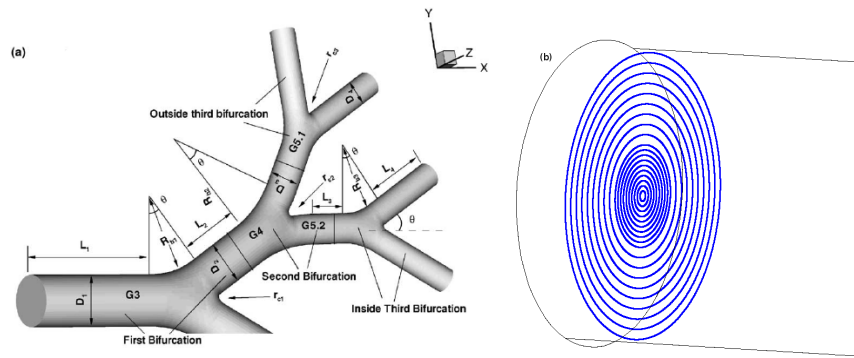


FIG. 2 – (a) Schéma géométrique de la triple bifurcation [11]; (b) Schéma de distribution des particules à l'entrée du tube d'admission (G3).

3 Résultats et discussion

L'étude numérique de ce modèle dynamique fluide-particule a été validée avec différents ensembles de données expérimentales pour des cas d'écoulements stationnaires (Comer et Al., 2000, 2001) et instationnaires (Zhang et Kim, 2002). Dans ce papier, nous nous focaliserons sur l'analyse des premiers résultats obtenus afin de valider la modélisation.

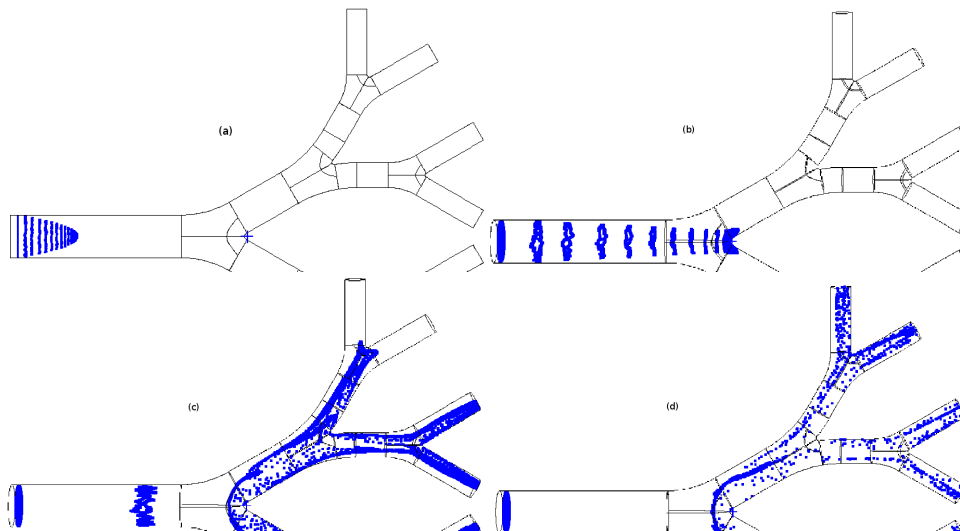


FIG. 3 – Evolution en temps de l'impulsion volumétrique des particules : (a) $t=0.005s$; (b) $t=0.06s$; (c) $t=0.1s$; et (d) $t=0.12s$.

Au total, 19 000 particules sphériques sont introduites initialement, dans une configuration plane (voir figure 2, (b)) ($Re_{D1} = 500$, $St_{D1} = 0.02$, pas de temps=0.001s) et nous avons relevé en quatre instants différents, l'évolution en temps de ces particules dans les voies aériennes (voir figure 3). On constate que les particules voyagent essentiellement dans les voies les plus à l'intérieur. A $t=0.12s$, la majorité des particules a atteint la sortie du domaine de calcul.

La figure 4 montre les visualisations observées à la fin de la simulation numérique. Des dépôts massifs ont lieu exclusivement dans les bifurcations des différentes générations et plus on s'enfonce dans les conduits moins il y a de dépôts de particules. Toutefois, en faisant varier le nombre de Reynolds, on constate, qu'à $Re_{D1} = 1500$, la concentration de dépôts de particules est plus dense comparée aux autres.

L'influence de l'inertie de la particule se fait sentir ici dans figure 4, en effet, les particules admises dans ces conduits aériens suivent les lignes de courant du fluide gaz (l'air) jusqu'au moment où ces dernières divergent pour contourner les bifurcations qui forment l'obstacle. Ainsi, les particules qui ont une inertie suffisante vont continuer leurs trajets et quitter les lignes de courant pour impacter la paroi de la bifurcation. Ce type de mécanisme est généralement quantifié par le nombre de Stokes, défini comme le rapport entre le temps de dépôt de la particule et le temps de l'écoulement du fluide de G3 à G6.

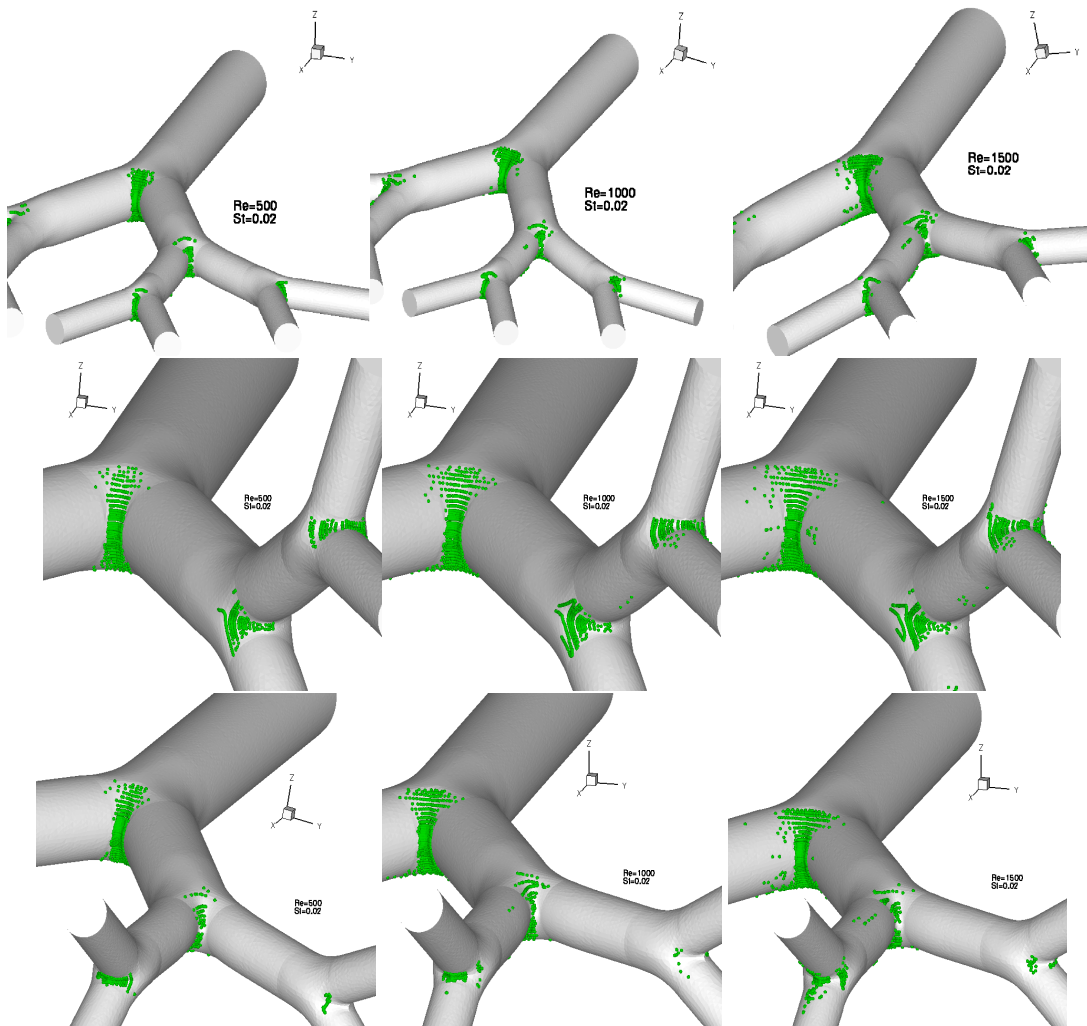


FIG. 4 – Les modes de dépôts de particules dans les différentes bifurcations .

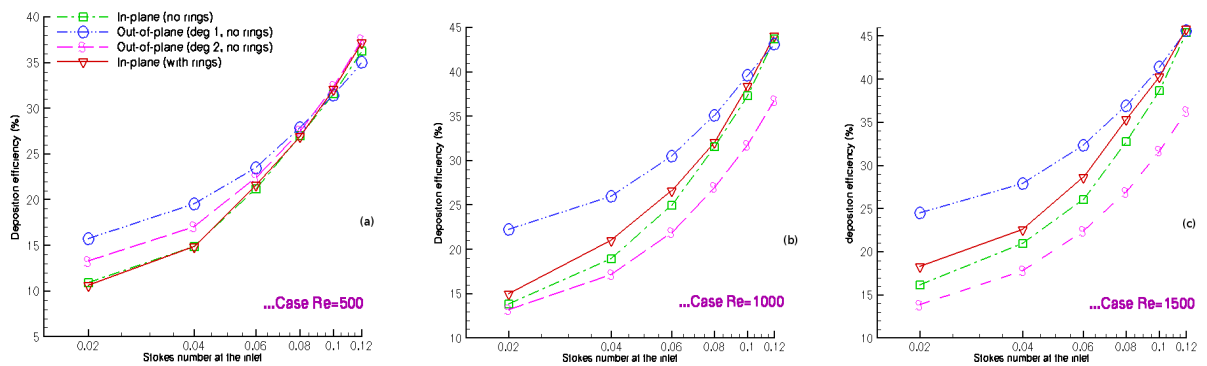


FIG. 5 – Efficacité de dépôts en fonction de nombre de Stokes pour différents cas du nombre de Reynolds : (a) Re=500, (b) Re=1000, (c) Re=1500.

L'efficacité de dépôts (DE) se définit comme étant le rapport entre le nombre de particules déposés dans une région donnée et le nombre de particules admis initialement dans la trachée (G3). Ainsi, sur la figure 5,

on a tracé l'efficacité de dépôt des particules (en %) en fonction de nombres de Stokes (St). Une différence assez nette et constante ($Re_{D1} = 1000$ et $Re_{D1} = 1500$ (figure 5, (b) et (c))) s'observe sur les deux modèles tridimensionnels quant à l'efficacité de dépôts des particules. D'un point de vue général, la géométrie joue un rôle important quant à l'efficacité de dépôts dans les conduits aériens. La plus grande différence de dépôts, pour tous les cas, s'observe pour des nombres de Stokes faibles $0.02 \leq St \leq 0.08$. Au delà de ($St = 0.08$), les différences deviennent minimales (voir figure 5(a)).

Par ailleurs, dans le modèle plan, la présence des anneaux cartilagineux dans le tube d'admission, n'affecte quasiment pas les résultats (figure 5(a)) pour le Reynolds de 500, ou légèrement (figure 5, (b) et (c)) pour les autres nombres de Reynolds. Plus le nombre de Stokes augmente et plus le taux d'efficacité de dépôt des particules est important ce qui est cohérent car les particules étant plus lourdes, elles ont plus d'inertie.

4 Conclusion

L'étude du transport des particules inhalées dans des conduits des voies aériennes humaines nous a permis de comprendre les modes de dépôt dans des modèles à triple bifurcation, représentant les générations G3-G6 du modèle de Weibel. Ainsi, ce sont les particules d'un diamètre compris entre un et cinq microns qui se déposent le plus efficacement dans les voies aériennes.

L'efficacité de dépôt est corrélée avec les nombres de Stokes ($0.02 \leq St \leq 0.12$) et de Reynolds ($Re = 500$, $Re = 1000$ et $Re = 1500$) pour estimer le taux de dose des dépôts des particules dans les voies aériennes. La géométrie joue un rôle important sur l'efficacité des dépôts puisque le taux de dépôts des particules, dans la configuration hors-plan (deg 1), reste nettement supérieur par rapport aux autres.

D'autre part, près des parois extérieures, le dépôt des particules est quasiment nul, d'où la concentration massive sur les surfaces des parois intérieures car plus le nombre de Reynolds augmente et plus la concentration devient énorme. Par ailleurs, l'utilisation des anneaux trachéaux au niveau de la paroi du tube d'admission n'a pas entraîné une différence significative sur les dépôts des particules dans les configurations planaires.

Par la suite, on s'intéressera à l'étude des écoulements instationnaires suivie de l'interaction entre le fluide et la structure.

Références

- [1] Dunbar C. A. and Hickey A. J. Design of aerosol systems for drug delivery to the lungs using numerical methods. Medical applications of computer modelling : the respiratory systems WIT press Southampton, 2001.
- [2] Weibel E. R. The pathway for oxygen, structure and function in the mammalian respiratory system. Harvard University Press, 1984.
- [3] Katz I. M., Schroeter J. D., and Martonen T. B. Factors affecting the deposition of aerosolized insulin. Diabetes Technology and Therapeutics, 3, 387–397, 2001.
- [4] Weibel E. R. Morphometry of the human lung. New York, Academic Press, 1963.
- [5] Zhang Y. and Finaly W. H. Measurement of the effect of cartilaginous rings on particle deposition in a proximal lung bifurcation model. Aerosol Sciences and Technology, 39, 394–399, 2005.
- [6] Li Z., Kleinstreuer C., and Zhang Z. Simulation of airflow fields and microparticle deposition in realistic human lung airway models. part ii : Particle transport and deposition. European Journal of Mechanics B/Fluids, 26, 650–668, 2007.
- [7] Comer J. K., Kleinstreuer C., and Zhang Z. Flow structures and particle deposition patterns in double-bifurcation airway models. part 1. air flow fields. Journal of Fluid Mechanics, 435, 25–54, 2001.
- [8] Li Z., Kleinstreuer C., and Zhang Z. Simulation of airflow fields and microparticle deposition in realistic human lung airway models. part i : Airflow patterns. European Journal of Mechanics B/Fluids, 26, 632–649, 2007.
- [9] Zhang Z., Kleinstreuer C., and Kim C. S. Aerosol deposition efficiencies and upstream release position for different inhalation modes in an upper bronchial airway model. Aerosol Sciences and Technology, 36, 828–844, 2002.
- [10] Comer J. K., Kleinstreuer C., and Kim C. S. Flow structures and particle deposition patterns in double-bifurcation airway models. part 2. aerosol transport and deposition. Journal of Fluid Mechanics, 435, 55–80, 2001.
- [11] Zhang Z., Kleinstreuer C., and Kim C. S. Cyclic micron-size particle inhalation and deposition in a triple bifurcation lung airway model. Journal of Aerosol Science, 33, 257–281, 2002.